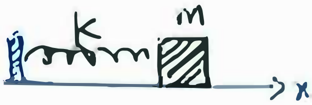
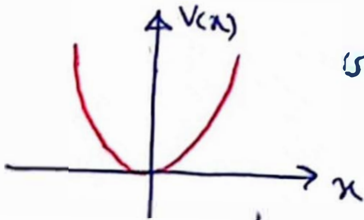
1



$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2$$



نوسانگر کوانتومی یک بعدی

ارتعاشات شبکه
واتم ها و...

← پتانسیل زوج است ← هامیلتونی با پاریته جابجا می‌شود

توابع موج یکی از پاریته زوج و فرد هستند

حالت پایه ← متقارن (زوج) است

← چون از دو طرف محدود است ← انرژی گسسته است

$\hat{H}$

هدف: یافتن ویژه مقادیر و ویژه بردارهای هامیلتونی است.

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}K\hat{x}^2$$

برای سادگی $\hat{P}_x \to \hat{P}$ یک بعد است

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

برای یافتن ویژه مقادیر و ویژه بردارها دو روش داریم:
- نوتاسیون دیراک (ماتریسی)
- نمایش مختصاتی

حل مسئله با روش ماتریسی: ← $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$|n\rangle$ ویژه بردار

E_n ویژه مقدار

⇐ ???

نکته: هامیلتونی با پاریته $\hat{P}$ جابجا می‌شود

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$$

هامیلتونی با عملگر مکان جابجا نمی‌شود:

$$[\hat H, \hat x] = \left[\frac{\hat p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat x^2, \hat x\right]$$

$$= \frac{1}{2m}\underbrace{[\hat p^2, \hat x]}_{\neq 0} + \frac{1}{2} m\omega^2 \underbrace{[\hat x^2, \hat x]}_{0} \neq 0$$

* در پایه‌ای که $\hat H$ قطری است، $\hat x$ قطری نیست.
* $\hat x$ ثابت حرکت نیست.

هامیلتونی با عملگر تکانه خطی جابجا نمی‌شود

$$[\hat H, \hat p] = \left[\frac{\hat p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat x^2, \hat p\right] = \frac{1}{2m}\underbrace{[\hat p^2, \hat p]}_{0} + \frac{1}{2} m\omega^2 \underbrace{[\hat x^2, \hat p]}_{\neq 0}$$

$$\Rightarrow [\hat H, \hat p] \neq 0$$

* در پایه‌ای که $\hat H$ قطری است، $\hat p$ قطری نیست.

برای حل مسئله از دو عملگر کمکی استفاده می‌کنیم.

عملگر خلق ← بالابرنده
عملگر فنا ← پایین‌آورنده

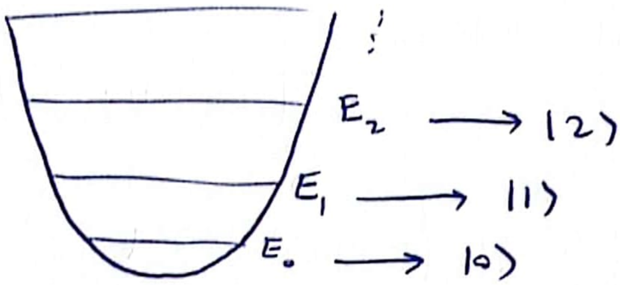
} ← عملگرهای نردبانی

→ شبیه تبدیلاتی که در کلاسیک استفاده کردیم

خلق: $\hat a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat x - i\frac{\hat p}{m\omega}\right)$ ← علامت plus است

فنا: $\hat a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat x + i\frac{\hat p}{m\omega}\right)$

ویژگی عملگرهای نردبانی:



* این عملگرها کمک می‌کنند که با داشتن یکی از ویژه‌بردارها، بتوان بقیه را حساب کرد

* این عملگرها فیزیکی نیستند، مشاهده‌پذیر نیستند $\Leftarrow$ غیرهرمیتی اند

$$\hat a^{+} \neq \hat a$$

$$(\hat a^{+})^{\dagger} \neq \hat a^{+}$$

نکته: این عملگرها دگر پذیرند

$$\hat a^{\dagger} = \left\{\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat x + i\frac{\hat p}{m\omega}\right)\right\}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat x^{\dagger} - i\frac{\hat p^{\dagger}}{m\omega}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat x - i\frac{\hat p}{m\omega}\right) = a^{+} \Rightarrow \boxed{\hat a^{\dagger} = \hat a^{+}}$$

به طور مشابه:

$$(\hat a^{+})^{\dagger} = \hat a$$

* اینها عملگرها با هامیلتونی جابجا نمی‌شوند $\Leftarrow$
- در پایه‌ای که $\hat H$ قطری است
$\hat a^{+} , \hat a$ غیرقطری است
- کت‌های $|n\rangle$ که ویژه‌بردارهای هامیلتونی هستند، ویژه‌بردارهای این دو عملگر نیستند

چنانچه عملگرهای نردبانی روی $|n\rangle$ ها اثر کنند آنها را تغییر می‌دهند.

سوال:
$$[\hat{H},\hat{a}] = ?$$
$$[\hat{H},\hat{a}^+] = ?$$

جواب را به بعد موکول می‌کنیم

نکته آخر: این دو عملگر با یکدیگر نیز جابجا نمی‌شوند

$$[\hat{a},\hat{a}^+] \neq 0$$

اثبات:
$$[\hat{a},\hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$$
$$- \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left\{\begin{matrix}\cancel{\hat{x}^2} - i\,\hat{x}\frac{\hat{p}}{m\omega} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\hat{x} + \cancel{\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}} \\ -\cancel{\hat{x}^2} - i\frac{\hat{x}\hat{p}}{m\omega} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\hat{x} - \cancel{\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}}\end{matrix}\right\}$$

$$= \frac{i\,m\omega}{\hbar m\omega}\left\{\hat{p}\hat{x}-\hat{x}\hat{p}\right\} = \frac{i}{\hbar}[\hat{p},\hat{x}] = \frac{i}{\hbar}(-i\hbar) = 1$$

لذا:

$$[\hat{a},\hat{a}^+] = 1 \Longrightarrow [\hat{a}^+,\hat{a}] = -1$$

روش دوم:

$$[\hat{a},\hat{a}^+] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i\hat{p}}{m\omega}\right),\ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\right]$$
$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\underbrace{\cancel{[\hat{x},\hat{x}]}}_{0} - \frac{i}{m\omega}\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{i\hbar} + \frac{i}{m\omega}\underbrace{[\hat{p},\hat{x}]}_{-i\hbar} + \frac{1}{m^2\omega^2}\underbrace{\cancel{[\hat{p},\hat{p}]}}_{0}\right) = 1$$

این عملگرها به چه دردی می‌خورند ← ابزاری برای یافتن ویژه‌بردارهای هامیلتونی‌اند

تعریف می‌کنیم: عملگر تعداد number operator

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$$

بالابرنده — پایین کننده

می‌توان نشان داد عملگر $\hat{N}$ هرمیتی است:

$$\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^+\hat{a})^\dagger = \hat{a}^+(a^+)^\dagger = \hat{a}^+\hat{a} = \hat{N}$$

از صفحهٔ 3 جزوه

لذا ویژه‌مقدارهای $\hat{N}$ حقیقی‌اند

از این $\hat{N}$ می‌توان برای تحلیل مسئله استفاده کرد

$$\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left\{\hat{x}\hat{x} + i\,\hat{x}\frac{\hat{p}}{m\omega} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\hat{x} + \frac{1}{m^2\omega^2}\hat{p}\hat{p}\right\}$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left\{\hat{x}^2 + \frac{i}{m\omega}\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{i\hbar} + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}\right\}$$

محاسبات ساده

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left\{\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hat{p}^2}{2m}\right\}$$

$$\Rightarrow \hat{N} = \frac{1}{\hbar\omega}\left\{\hat{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{1}\right\}$$

چون کل عبارت عملگر است یک ماتریس واحد اضافه می‌کنیم

یادمان باشد بنویسیم ← $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\hat{1}$

حال می‌توان هامیلتونی را برحسب $\hat{N}$ نوشت

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{1}\right)}$$

توجه: فعلاً مسئله نوسانگر یک بعدی است

برای سه بعدی $\frac{1}{2}$ به $\frac{3}{2}$ تغییر می‌یابد (نوسانگر همسانگرد)

نکات: عملگر تعداد با عملگر هامیلتونی جابجا می‌شود

$$[\hat{H}, \hat{N}] = \left[\hbar\omega\hat{N} + \frac{\hbar\omega}{2}\hat{1}, \hat{N}\right]$$

$$= \hbar\omega\,\cancel{[\hat{N}, \hat{N}]} + \frac{\hbar\omega}{2}\,\cancel{[\hat{1}, \hat{N}]} = 0$$

لذا $\hat{H}$ و $\hat{N}$ ویژه بردارهای یکسانی دارند

درمی‌یابیم که $\hat{H}$ قطری باشد ← $\hat{N}$ هم قطری است

لذا اگر ویژه بردارهای عملگر $\hat{N}$ را پیدا کنیم

ویژه بردارهای $\hat{H}$ را یافته‌ایم

نکته اصلی این نوسانگر

اما قبل از پرداختن به بقیه مسئله چند نکته:

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^{+}\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^{+}\underbrace{\cancel{[\hat{a}, \hat{a}]}}_{0} + \underbrace{[\hat{a}^{+}, \hat{a}]}_{-1}\hat{a} = -\hat{a}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^{+}] = [\hat{a}^{+}\hat{a}, \hat{a}^{+}] = \hat{a}^{+}\underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^{+}]}_{1} + \underbrace{\cancel{[\hat{a}^{+}, \hat{a}^{+}]}}_{0}\hat{a} = \hat{a}^{+}$$

حل مسئله :

$|n\rangle$ ویژه بردار $\hat{H}$ و $\hat{N}$ است چون $[\hat{N},\hat{H}]=0$ است:

$$\begin{cases} \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \\ \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \end{cases}$$

$$\hbar\omega(\hat{N}+\tfrac{1}{2})|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$\hbar\omega\hat{N}|n\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$\hbar\omega n|n\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

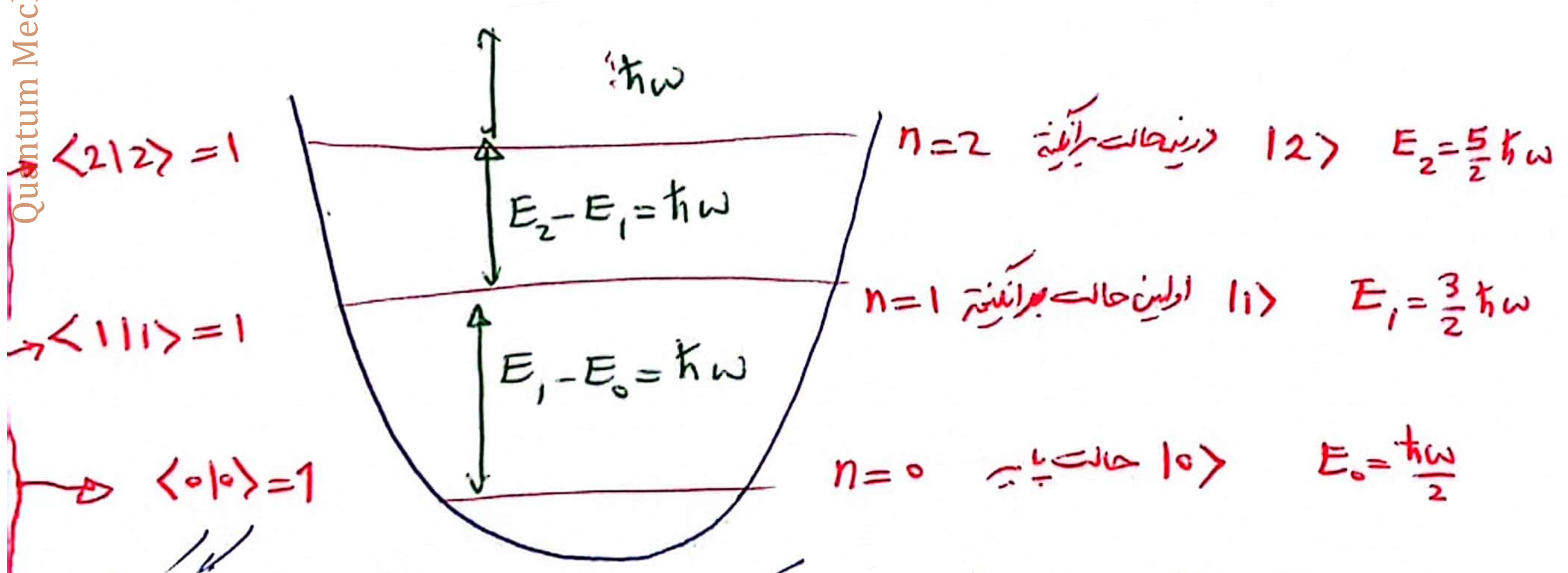
$$\boxed{E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega}$$

لذا ویژه مقادیر $\hat{N}$ و $\hat{H}$ نیز بهم مربوطند

n ویژه مقادیر عملگر تعداد بود

$n=0,1,2,3,\dots$

اینکه این مقادیر را می‌تواند بگیرد بعداً اثبات می‌کنیم



← اختلاف ویژه مقادیر $\hbar\omega$ است ← همسایگان است ** فقط در نوسانگر یک بعدی

نکته : چون ویژه بردارها، ویژه مقادیر یکسانی ندارند و هامیلتونی هرمیتی است لذا، ویژه بردارهای نوسانگر یک بعدی دو به دو بر هم عمودند

$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$

$|n\rangle$ ویژه‌بردار $\hat{N}$ و $\hat{H}$ است.

$\hat{a}|n\rangle = ?$

$\hat{a}^{+}|n\rangle = ?$

سوال: اثر عملگرهای نردبانی روی $|n\rangle$ چیست؟

جواب/ $\hat{a}|n\rangle = ?$

ابتدا حاصل رابطه زیر را بررسی می‌کنیم

صفر را اضافه کردیم

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (\underbrace{\hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N}}_{[\hat{N},\hat{a}]} + \hat{a}\hat{N})|n\rangle$$

$$= ([\hat{N},\hat{a}] + \hat{a}\hat{N})|n\rangle$$

$$= (-\hat{a} + \hat{a}\hat{N})|n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{N}\hat{a}|n\rangle = -\hat{a}|n\rangle + \hat{a}\hat{N}|n\rangle$$

$$= -\hat{a}|n\rangle + \hat{a}\hat{n}|n\rangle$$

$$= (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

لذا $\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$

لذا بردار $\hat{a}|n\rangle$ ویژه‌بردار $\hat{N}$ است با ویژه‌مقدار $(n-1)$

از طرفی داشتیم:

$$\hat{N}|n-1\rangle = (n-1)|n-1\rangle$$

ازاین دو رابطه می‌توان نتیجه گرفت که بردار $\hat{a}|n\rangle$ در راستای $|n-1\rangle$ است

اثر عملگر فنا روی ویژه بردارها

9

$$\boxed{\hat{a}|n\rangle = \alpha|n-1\rangle}$$

α یک ضریب است (عدد است). باید آن را بیابیم

از الحاقی رابطه دیگری می‌گیریم

$$\langle n|\hat{a}^\dagger = \langle n-1|\alpha^*$$

$$\boxed{\langle n|\hat{a}^\dagger = \alpha^*\langle n-1|}$$

چپ را در چپ و راست را در راست ضرب می‌کنیم

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = |\alpha|^2\langle n-1|n-1\rangle$$

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = |\alpha|^2 \quad 1$$

$$n\langle n|n\rangle = |\alpha|^2$$

$$n = |\alpha|^2 \longrightarrow \alpha = \sqrt{n}$$

$$\boxed{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}$$

لذا عملگر فنا اگر روی ویژه بردار $|n\rangle$ اثر کند

ویژه بردار پایین‌تر $|n-1\rangle$ را می‌دهد.

* با استفاده از نردبان پایین می‌رویم

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \Leftarrow$$
$$\hat{a}|1\rangle = |0\rangle$$
$$\hat{a}|2\rangle = \sqrt{2}\,|1\rangle$$
$$\hat{a}|3\rangle = \sqrt{3}\,|2\rangle$$

به طریق مشابه می‌توان نشان داد که عملگر خلق اگر روی حالت $|n\rangle$ اثر کند آن را یک واحد بالا می‌برد

$\hat{a}^{+}|0\rangle = 1$

$\hat{a}^{+}|1\rangle = \sqrt{2}\,|2\rangle$

$\hat{a}^{+}|2\rangle = \sqrt{3}\,|3\rangle$

$$\boxed{\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\;|n\rangle}$$

به عنوان تمرین استخراج کنید.

تمرین: نشان دهید n مثبت است.

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

جواب)

$\langle n| \times \;\cdots\cdots$

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|n|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n$$

$$\langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = n$$

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = n$$

از آنجا که ضرب تنسوری هر کتی در خودش مثبت است

$$\langle \alpha|\alpha\rangle \geq 0$$

لذا

$$n \geq 0$$

تمرین: نشان دهید مقادیر قابل قبول برای n اعداد صحیح است: یعنی

$$n = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots\ldots$$

کاربرد عملگرهای نردبانی:

$$\hat{a}^+|0\rangle = |1\rangle \Longrightarrow |1\rangle = \hat{a}^+|0\rangle$$

لذا اگر حالت پایه $|0\rangle$ را داشته باشیم می‌توان از این رابطه ویژه بردار بعدی (یعنی $|1\rangle$) را بدست آورد

$$a^+|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle \Rightarrow |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2}}|0\rangle$$

لذا اگر حالت پایه را داشته باشیم $|2\rangle$ را هم می‌توان حساب کرد

به همین صورت می‌توان ادامه داد،

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^+|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{1\times2\times3}}(\hat{a}^+)^3|0\rangle$$

$$\vdots$$

$$\boxed{|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle}$$

کاربرد بسیار مهمتر، محاسبه ویژه تابع است ← (نمایش مختصه‌ای)

هر چند بعداً ویژه تابع را در نمایش مختصه‌ای (از روش) سخت و نفس‌گیر حساب کنیم

اما اینجا نشان می‌دهیم که با نمایش ماتریسی خیلی راحت‌تر می‌توان آن‌ها را حساب کرد

ابتدا مقدمه چینی می‌کنیم:

حالت پایه $n=0 \longrightarrow E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

$\longrightarrow |0\rangle \xrightarrow[\text{تابع موج}]{} \psi_0 = \langle x|0\rangle$

لذا $\psi_0(x)$ تابع موج حالت پایه در نمایش مختصه‌ای است.

* طبق گفته‌های قبلی اینجا تابع قطعاً زوج است

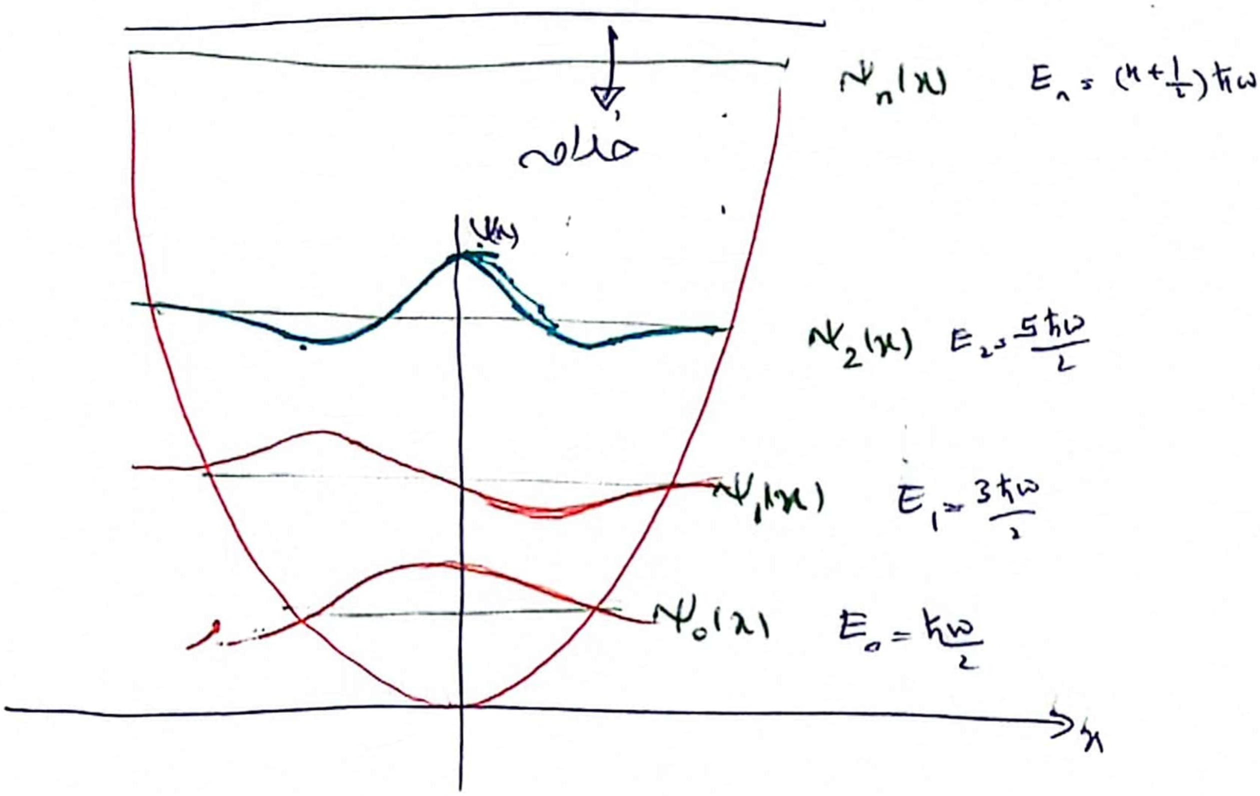
اولین حالت برانگیخته

$n=1 \longrightarrow E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

$|1\rangle \xrightarrow{\text{تابع موج}} \psi_1 = \langle x|1\rangle$

لذا $\psi_1(x)$ تابع موج اولین حالت برانگیخته است

و طبق صحبت‌های قبلی قطعاً فرد است



لذا اگر n زوج باشد ← حالت ψ_n زوج و تابع موج متقارن است

اگر n فرد باشد ← حالت ψ_n فرد و تابع موج فرد است.

این توابع موج دو به دو بر هم عمودند و بهنجار هستند ⇐

$$\langle n|m\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_m(x)\,dx = \delta_{nm}$$

* دوباره یادآوری شود که هامیلتونی سیستم تبهگنی ندارد.

سوال : تابع موج حالت پایه نوسانگر تک بعدی را حساب کنید

$$\psi_0(x) = ?$$

روش اول : استفاده از عملگر فنا

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \Rightarrow \langle x|\hat{a}|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle x|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)|0\rangle = 0$$

$$\underbrace{\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\langle x|\hat{x}|0\rangle + \frac{i}{m\omega}\langle x|\hat{p}|0\rangle\right)}_{=0}$$

$$x\langle x|0\rangle + \frac{i}{m\omega}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle = 0$$

در اینجا از نمایش مختصه‌ای عملگرهای مکان و تکانه استفاده کرده‌ام

$$\boxed{x\psi_0(x) + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d\psi_0(x)}{dx} = 0} \longrightarrow \psi_0(x) \text{ مجهول است}$$

این یک معادله مرتبه اول برحسب x است

ثابت زیر را تعریف می‌کنیم $\quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

ضرب طرفین در $\frac{m\omega}{\hbar}$

لذا

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) = 0$$

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} + \frac{x}{x_0^2}\psi_0(x) = 0$$

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} = -\frac{x}{x_0^2}\,dx$$

$$\boxed{\psi_0(x) = A e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}}$$

که A ثابت نرمالیزاسیون است

$$\langle 0|0\rangle = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x)\,\psi_0(x)\,dx = 1$$

تمرین: نشان دهید که

$$A = \frac{1}{\sqrt{x_0}\,\sqrt[4]{\pi}}$$

حالت پایه

* زوج است

* چگالی احتمال نیز متقارن است $P = |\psi_0(x)|^2$

احتمال حضور ذره در $x=0$ بیشترین مقدار است.

* چگالی جریان $J(x)$ صفر است. نه تنها برای این حالت بلکه برای تمامی حالت ها زیرا توابع موج حقیقی اند در این مسئله

روش دوم برای محاسبه حالت پایه: استفاده از نمایش مختصه ای و حل معادله شرودینگر است که در جلسات بعدی به آن می رسیم

محاسبه تابع موج اولین حالت برانگیخته ← روش

- عملگر فنا
- عملگر خلق
- حل معادله شرودینگر

روش اول: استفاده از عملگر فنا

$$\hat{a}^2|1\rangle = 0$$

$$\langle x|\hat{a}^2|1\rangle = 0$$

$$\langle x|\underbrace{\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)}|1\rangle = 0$$

به نحوه نوشتن $\hat{a}^2$ دقت شود

⋮

در نهایت به رابطه زیر می رسیم

$$\left(x + x_0^2\frac{d}{dx}\right)\left(x + x_0^2\frac{d}{dx}\right)\psi_1(x) = 0$$

یک معادله مرتبه دوم برحسب x است که حل آن سخت تر از معادله مرتبه اول است ← $\psi_1(x)$ را بدست می آوریم و نرمالیزه می کنیم.

چون این روش سخت است از خیر آن می گذریم

(خودتان تمرین کنید ببینید چند مرده حلاجید)

استفاده از عملگر خلق برای محاسبه اولین حالت برانگیخته

از قبل داشتیم:

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

لذا

$$|1\rangle = \hat{a}^+|0\rangle \xrightarrow{\langle x|\times} \langle x|1\rangle = \langle x|\hat{a}^+|0\rangle$$

$$\Rightarrow \psi_1(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x|\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}|0\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\langle x|\hat{x}|0\rangle - \frac{i}{m\omega}\langle x|\hat{p}|0\rangle\right)$$

لذا

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x\,\psi_0(x) - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d\psi_0(x)}{dx}\right)$$

که از این رابطه شکل (نمایش) عملگرهای $\hat{x}$ و $\hat{p}$ در نمایش مختصه استفاده شده

کافی است بجای $\psi_0(x)$ قرار دهیم که از قبل داشتیم

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}\sqrt[4]{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

و $\psi_1(x)$ را بدست آورید ← تمرین کنید

نکته: تابع موج اولین حالت برانگیخته فرد است.

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\Bigg(\underbrace{\underbrace{\underset{\text{فرد}}{x}\,\underset{\text{زوج}}{\psi_0(x)}}_{\text{فرد}} - \frac{\hbar}{m\omega}\underset{\text{فرد}}{\frac{d\psi_0(x)}{dx}}}_{\text{فرد}}\Bigg)$$

۱۷

روش سوم برای محاسبه تابع موج اولین حالت برانگیخته، حل معادله شرودینگر
در نمایش مختصات است که بعداً به آن می‌رسیم

سوال: شکل ماتریسی هامیلتونی نوسانگر هماهنگ را بنویسید (در پایه خودش)

- نمایش آن قطری است
- ابعاد آن بی‌نهایت است چون بی‌نهایت ویژه‌بردار دارد

$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots |n\rangle, \dots$

$$H_{nm} = \langle n|H|m\rangle = (m+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\langle n|m\rangle$$

$$= (m+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\,\delta_{nm}$$

$$\begin{array}{c|cccc} n \backslash m & |0\rangle & |1\rangle & |2\rangle & \dots \\ \hline \langle 0| & \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & 0\ \dots \\ \langle 1| & 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & 0\ \dots \\ \langle 2| & 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & 0\ \dots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \frac{7\hbar\omega}{2}\ \ddots \end{array}$$

توجه: عناصر روی قطر همان ویژه‌مقادیر $\hat{H}$ است (در پایه خودش)

سوال: شکل ماتریسی عملگر تعداد را بنویسید:

$[\hat{N}, \hat{H}] = 0$ لذا در ویژه‌پایه‌ی ($\hat{H}$) ماتریس $\hat{N}$ نیز قطری است.

$$N_{nm} = \langle n | \hat{N} | m \rangle = m \langle n | m \rangle = m\, \delta_{nm}$$

$$\begin{array}{cc} & m \rightarrow \\ n \downarrow & \\ \hat{N} = & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ \vdots & & & \ddots & \\ \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{bmatrix} \end{array}$$

سوال: شکل ماتریسی $\hat{a}$ (عملگر فنا)

$$a_{nm} = \langle n | \hat{a} | m \rangle = \sqrt{m} \langle n | m-1 \rangle$$

$$= \sqrt{m}\; \delta_{n,m-1}$$

لذا فقط سطر و ستونی که در آن $n = m-1$ است عنصر غیر صفر داریم

سطر ستون

$$\begin{array}{cc} & m \rightarrow \\ n \downarrow & \\ \hat{a} = & \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \end{bmatrix} \end{array}$$

قطر اصلی

$\hat{a}$ غیر قطری است

سوال : با استفاده از نمایش ماتریسی اثر عملگر فنا را روی حالت پایه بررسی کنید.

$$\hat{a}|0\rangle = ?$$

از قبل می‌دانیم که $\hat{a}|0\rangle = 0$ است اما می‌خواهیم به روش ماتریسی بررسی کنیم

حالت پایه یک بردار است

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

که اولین عنصر آن 1 و بقیه صفر است

لذا:

$$\hat{a}|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ & & \cdots & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

سوال : با استفاده از نمایش ماتریسی اثر عملگر فنا را روی اولین حالت برانگیخته حل کنید

$$\hat{a}|1\rangle = ?$$

از قبل می‌دانیم که جواب $\hat{a}|1\rangle = |0\rangle$ است اما به روش ماتریسی می‌خواهیم نشان دهیم.

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \Rightarrow \hat{a}|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \cdots \\ \cdots & & & & \sqrt{4} \\ & & \cdots & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

نشان‌دهنده بردار اولین حالت برانگیخته

تست کنید

(بقیه را خودتان برای حالت‌های بالاتر ←

لذا جواب را ~~...~~ بدست آوریم $|0\rangle$

سوال : شکل ماتریسی عملگر تا را بنویسید :

$$a^+_{nm} = \langle n|\hat{a}^+|m\rangle = \sqrt{m+1}\,\langle n|m+1\rangle = \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1}$$

لذا ← این عملگر نیز مانند $\hat{a}$ غیر قطری است

← سطر و ستونی که $\underset{\text{سطر}}{n} = \underset{\text{ستون}}{m+1}$ باشه غیر صفر است

$$\hat{a}^+ = \begin{array}{c|c} & m \rightarrow \\ \hline n \downarrow & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \end{bmatrix} \end{array}$$

قطر اصلی

می‌توانیم از این حقیقت که $\underset{\text{بالایی}}{\hat{a}^+} = \underset{\text{دگر}}{\hat{a}^+}$ است استفاده کنیم

و ماتریس $\hat{a}$ را که قبلاً بدست آورده بودیم را دگر کنیم تا $\hat{a}^+$ را بدهد

تمرین ← تحویل : اثر عملگر خلق را بر حالت پایه در نمایش ماتریسی بنویسید

تمرین ← تحویل : اثر عملگر خلق را بر اولین حالت برانگیخته نوسانگر بنویسید.

تمرین ← تحویل ، شکل ماتریسی $\hat{x}$ و $\hat{p}$ را بنویسید (راهنمایی : کافی است شکل ماتریسی a و a^+ را در روابط مربوط به $\hat{x}$ و $\hat{p}$ در صفحه 2 قرار دهید)

سوال: یک حالت نرمال نشده‌ای به صورت $|\alpha\rangle = A|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle$ است
این حالت را نرمالیزه کنید.

نکته: این حالت روی یکی از زیرفضا بردارها نیفتاده، بلکه هم روی $|0\rangle$ و
هم روی $|1\rangle$ تصویر دارد ⇐ حالت غیرمانا است

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \Rightarrow \left(A^*\langle 0| + \frac{1}{2}\langle 1|\right)\left(A|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle\right)$$

$$= |A|^2\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1} + \frac{A^*}{2}\underbrace{\langle 0|1\rangle}_{0} + \frac{A}{2}\underbrace{\langle 1|0\rangle}_{0} + \frac{1}{4}\underbrace{\langle 1|1\rangle}_{1} = 1$$

$$|A|^2 + \frac{1}{4} = 1 \Rightarrow |A|^2 = 1 - \frac{1}{4} = \frac{3}{4}$$

$$A = \frac{\sqrt{3}}{2} \Rightarrow \boxed{|\alpha\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle}$$

اگر دلمان بخواهد می‌توانیم شکل برداری $|\alpha\rangle$ را به صورت زیر بنویسیم

$$|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

سوال: کت حالت سامانه‌ای منطبق بر حالت پایه نوسانگر یک بعدی است

- مقادیر چشمداشتی عملگرهای $\hat{H}$، $\hat{N}$، $\hat{a}$، $\hat{a}^+$، $\hat{x}$، $\hat{p}$ را برای این حالت بررسی کنید

- احتمال اینکه ذره در $x \geq 0$ باشد چقدر است

نکته: چون $|\alpha\rangle = |0\rangle$ است ← حالت مانا است

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle 0|\hat{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}$$

← چون حالت مانا است مقدار چشمداشتی $\hat{H}$ همان ویژه مقدار این حالت است

$$\langle \hat{N} \rangle = \langle 0|N|0\rangle = 0$$

چون حالت مانا است مقدار چشمداشتی $\hat{N}$ همان ویژه مقدار شمارش این حالت است

$$\langle \hat{a} \rangle = \langle 0|\underbrace{\hat{a}|0\rangle}_{=0 \text{ صفر است}} \xrightarrow{\text{لذا}} \langle \hat{a} \rangle = 0$$

$$\langle \hat{a}^+ \rangle = \langle 0|\hat{a}^+|0\rangle = \langle 0|1\rangle = \delta_{01} = 0$$

چون $|1\rangle$ و $|0\rangle$ بر هم عمودند

$\langle \hat{x} \rangle = ?$ $\qquad \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$

$\langle \hat{p} \rangle = ?$ $\qquad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}\right)$

حال از این دو رابطه استفاده می‌کنیم $\hat{x}$ ، $\hat{p}$ را برحسب $\hat{a}$ ، $\hat{a}^+$ جایگذاری کنیم.

با یک سری عملیات ساده می‌توان نشان داد:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a}+\hat{a}^{+})$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(\hat{a}^{+}-\hat{a})$$

لذا کافیست به جای $\hat{x}$ و $\hat{p}$ از روابط بالا استفاده کنیم.

$$\langle \hat{x} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle 0|(\hat{a}+\hat{a}^{+})|0\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\underbrace{\cancel{\langle 0|\hat{a}|0\rangle}}_{0} + \underbrace{\cancel{\langle 0|\hat{a}^{+}|0\rangle}}_{0}\right) = 0$$

از قبل حساب کرده بودیم

$$\langle \hat{p} \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\langle 0|(\hat{a}^{+}-\hat{a})|0\rangle = 0$$

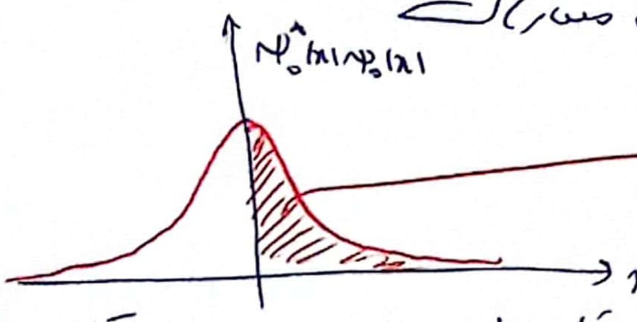
محاسبه احتمال اینکه ذره در $x \geq 0$ باشد:

$$P(x\geq 0) = \int_{0}^{\infty} \psi^{*}(x)\,\psi(x)\,dx$$

چون بردار منطبق بر حالت پایه است $\Longleftarrow$

$$\psi(x) = \psi_0(x) \longrightarrow$$

تابع موج متقارن است



چون مساحت کل 1 است

مساحت یک طرف $\frac{1}{2}$ و لذا احتمال $\frac{1}{2}$ است $\longleftarrow$ این نتیجه برای همه ترازها برقرار است

۲۴ سوال، یک حالت سامانه‌ای به صورت $|\alpha\rangle = |n\rangle$ است

مقادیر چشم‌داشتی $\langle \hat{H}\rangle$, $\langle \hat{N}\rangle$, $\langle \hat{a}\rangle$, $\langle \hat{a}^+\rangle$, $\langle \hat{x}\rangle$, $\langle \hat{p}\rangle$, $\langle \hat{x}^2\rangle$, $\langle \hat{p}^2\rangle$ را حساب کنید

نکته ـــــ یک حالت مانا است.

جواب /

$$\langle \hat{H}\rangle = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\langle \hat{N}\rangle = n$$

$$\langle \hat{a}\rangle = 0$$

* تکمیلی، جزئیات حل خود را با اشتراک بگذارید

$$\langle \hat{a}^+\rangle = 0$$

$$\langle \hat{x}\rangle = 0$$

$$\langle \hat{p}\rangle = 0$$

$$\langle \hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$$\langle \hat{p}^2\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

سوال: یک حالت سامانه‌ای به صورت $|\alpha\rangle = \frac{3i}{5}|0\rangle + A|1\rangle$ است

الف) A را حساب کنید. (به عبارتی کت حالت را نرمالیزه کنید)

ب) $\langle x\rangle$ را حساب کنید

ج) احتمال اینکه در اندازه‌گیری انرژی عدد $\frac{\hbar\omega}{2}$ بدست آید چقدر است.

د) تحول زمانی کیت حالت را بررسی کنید

جواب:

الف) روش اول

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \rightarrow \left(-\frac{3i}{5}\langle 0| + A^*\langle 1|\right)\left(\frac{3i}{5}|0\rangle + A|1\rangle\right) = 1$$

$$\frac{9}{25}\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1} - \frac{3iA}{5}\underbrace{\langle 0|1\rangle}_{0} + \frac{3iA^*}{5}\underbrace{\langle 1|0\rangle}_{0} + |A|^2\underbrace{\langle 1|1\rangle}_{1} = 1$$

$$|A|^2 = 1 - \frac{9}{25} \Rightarrow A = \frac{4}{5}$$

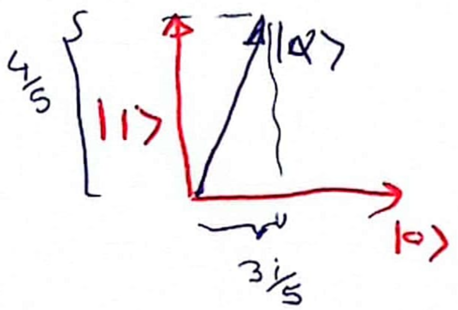
الف) روش اول به روش برداری

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \frac{3i}{5} \\ A \end{pmatrix}$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \Rightarrow \left(-\frac{3i}{5} \quad A\right)\begin{pmatrix} \frac{3i}{5} \\ A \end{pmatrix} = 1$$

$$\frac{9}{25} + A^2 = 1 \longrightarrow A = \frac{4}{5}$$

نکته: تصویر کت $|\alpha\rangle$ در امتداد $|1\rangle$ بیشتر از تصویر آن در امتداد $|0\rangle$ است



ب) $\langle\hat{x}\rangle$ چقدر است

$$\langle\hat{x}\rangle = \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\alpha|\hat{a}+\hat{a}^{+}|\alpha\rangle$$

به جای عملگر $\hat{x}$ برحسب خلق و نابودی جایگذاری کردیم

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(-\frac{3i}{5}\langle 0| + \frac{4}{5}\langle 1|\right)(\hat{a}+\hat{a}^{+})\left(\frac{3i}{5}|0\rangle + \frac{4}{5}|1\rangle\right)$$

به جای $|\alpha\rangle$ نیز کت و برای برا آن را نوشتیم

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} -\frac{3i}{5}\cancel{\langle 0|\hat{a}|0\rangle}^{0}\frac{3i}{5} - \frac{3i}{5}\overbrace{\langle 0|\hat{a}|1\rangle}^{1}\frac{4}{5} \\ -\frac{3i}{5}\cancel{\langle 0|\hat{a}^{+}|0\rangle}^{0}\frac{3i}{5} - \frac{3i}{5}\cancel{\langle 0|\hat{a}^{+}|1\rangle}^{0}\frac{4}{5} \\ +\frac{4}{5}\cancel{\langle 1|\hat{a}|0\rangle}^{0}\frac{3i}{5} + \frac{4}{5}\cancel{\langle 1|\hat{a}|1\rangle}^{0}\frac{4}{5} \\ +\frac{4}{5}\overbrace{\langle 1|\hat{a}^{+}|0\rangle}^{1}\frac{3i}{5} + \frac{4}{5}\cancel{\langle 1|\hat{a}^{+}|1\rangle}^{0}\frac{4}{5} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(-\frac{12i}{25}+\frac{12i}{25}\right) = 0$$

۱) محاسبه $\langle \hat{x} \rangle$ از روش اول

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha^*(x)\, x\, \psi_\alpha(x)\, dx$$

$$\psi_\alpha(x) = \frac{3i}{5}\psi_0(x) + \frac{4}{5}\psi_1(x)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[-\frac{3i}{5}\psi_0^*(x) + \frac{4}{5}\psi_1(x)\right] x \left[\frac{3i}{5}\psi_0(x) + \frac{4}{5}\psi_1(x)\right] dx$$

فرد

تابع فرد · زوج · زوج

$$= \frac{9}{25}\cancel{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0\, x\, \psi_0\, dx} - \frac{12i}{25}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0\, x\, \psi_1\, dx + \frac{16}{25}\cancel{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1\, x\, \psi_1\, dx} + \frac{12i}{25}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1\, x\, \psi_0\, dx = 0$$

فرد · فرد · زوج

فرد

0 0 0

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{تابع فرد}\; dx = 0$$

2) احتمال:

$$\underline{P}\left(E=\frac{\hbar\omega}{2}\right) \longrightarrow$$

باید تصویر یک حالت را روی ویژه بردار که ویژه مقدار آن $\frac{\hbar\omega}{2}$ است حساب کنیم

$\frac{\hbar\omega}{2}$ مربوط به یک حالت پایه است لذا

$$P = \left|\langle 0|\alpha\rangle\right|^2$$

$$= \left|\langle 0|\left(\frac{3i}{5}|0\rangle+\frac{4}{5}|1\rangle\right)\right|^2$$

$$= \left|\frac{3i}{5}\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1}+\frac{4}{5}\underbrace{\langle 0|1\rangle}_{0}\right|^2$$

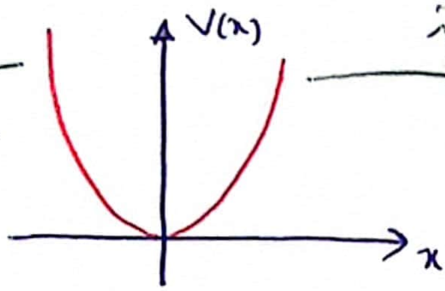
$$= \left|\frac{3i}{5}\right|^2 = \frac{9}{25}$$

1

نوسانگر یک بعدی ← حل معادله شرودینگر: نمایش مختصه‌ای

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

پتانسیل زوج است ←
توابع موج زوج و فرد هستند



→ پتانسیل از دو طرف تا بی‌نهایت ادامه می‌کند
← ترازهای انرژی گسسته‌اند

معادله شرودینگر

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

eigen value

eigen function
ویژه تابع

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

به دنبال ψ هایی هستیم که به همراه E معادله بالا را ارضا کنند.

← توجه: برخلاف چاه پتانسیل، اینجا ~~[illegible]~~

ψ خابجای نیست

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

برای ساده‌تر شدن شکل معادلات تغییر متغیرهای زیر را اعمال می‌کنیم

$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \qquad \xi = \sqrt{\alpha}\,x \qquad \lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

توجه: λ در دل خود E را دارد و ξ در دل خود x را دارد.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\xi^2\psi + \lambda\psi = 0$$

مشتق را برحسب متغیر جدید باید بگیریم. لذا به روابط زیر نیاز داریم

$$\frac{d}{d\xi} = \frac{dx}{d\xi}\frac{d}{dx} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\frac{d}{dx} \quad \Bigg\} \quad \frac{d^2}{d\xi^2} = \frac{1}{\alpha}\frac{d^2}{dx^2} \Bigg\} \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} = \alpha\frac{d^2}{d\xi^2}$$

۲

$$\alpha \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \alpha\xi^2\psi(\xi) + \lambda\psi(\xi) = 0$$

با حذف α از کل عبارت:

$$\boxed{\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - \xi^2\right)\psi(\xi) = 0}$$

حل با کمک مشتقات چیزی که هم از ψ و هم بصورت صریح در معادله ایجاد می‌شود

نکات: * $\frac{\lambda}{\alpha}$ عدد است

$\alpha \rightarrow$ حضور ثابت فیزیکی: m, ω, $\hbar$

$\lambda \rightarrow$ در خود انرژی را دارد

* چون انتظار داریم در این مسئله E گسسته باشه $\Leftarrow$ انتظار داریم λ گسسته باشه

* $\psi(\xi)$ ها جواب‌های معادله شرودینگر هستند $\Leftarrow$ قیدی که روی آنها داریم خوش‌رفتار بودن آنهاست

$$\lim_{\xi \to +\infty} \psi(\xi) \to 0 \qquad \lim_{\xi \to -\infty} \psi(\xi) \to 0$$

$\psi(\xi)$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\psi(\xi) = \underbrace{G(\xi)}_{\text{رفتار } \psi \text{ را در } \pm\infty \text{ تعیین می‌کند}} \; \underbrace{H(\xi)}_{\text{عمده رفتار } \psi \text{ را در } 0 \text{ تعیین می‌کند}}$$

جایگذاری /

$$\frac{d^2(GH)}{d\xi^2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - \xi^2\right)GH = 0$$

۳

درحد $\xi \to \pm\infty \Leftarrow \psi \to G$

چون G نقش زیادتر ψ در این نواحی را نشان می‌دهد

$$\frac{d^2G}{d\xi^2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - \xi^2\right)G = 0$$

اما توجه داریم در حد $\infty \to |\xi|$ هستیم لذا

$$\xi^2 \gg \frac{\lambda}{\alpha}$$

$$\frac{d^2G}{d\xi^2} + (-\xi^2)G = 0 \to \frac{d^2G}{d\xi^2} - \xi^2 G = 0$$

این معادله دو جواب عمومی دارد

(1) $G \propto e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

(2) $G \propto e^{\xi^2/2}$

اگر $\xi \to \pm\infty$ جمله (1) به صفر میل می‌کند اما جمله (2) واگرا می‌شود
(به توان 2 برای ξ دقت کنید)

لذا جواب خوش‌رفتار (یعنی (1)) را انتخاب می‌کنیم. لذا تا اینجا داریم

$$\psi = G(\xi)\,H(\xi) \to \boxed{\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi)}$$

حالا هدف یافتن H است.

نکته: طبق پیشینی ψ باید زوج یا فرد باشد.

$e^{-\xi^2/2}$ تابع زوج است

لذا H باید تابع زوج یا فرد برحسب ξ باشد

$\boxed{4}$

جاگذاری ψ در معادله شرودینگر

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\left(e^{-\xi^2/2}H(\xi)\right)+\left(\frac{\lambda}{\alpha}-\xi^2\right)e^{-\frac{\xi^2}{2}}H(\xi)=0$$

پس از مشتق‌گیری از عبارت اول و حذف جملات مشترک از معادله:

← به عنوان تمرین انجام دهید

$$\frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}+\left(\frac{\lambda}{\alpha}-1\right)H=0$$

معادله هرمیت (شکل کلی آن را به خاطر بسپارید)

می‌دانیم که $H(\xi)$ که در رابطه فوق (معادله هرمیت) صدق می‌کند قرار است رفتار $\psi(\xi)$ را در $\xi \to 0$ نمایان کند. پس $H(\xi)$ را به صورت بسط چندجمله‌ای می‌نویسیم.

$$H(\xi)=a_0+a_1\xi+a_2\xi^2+a_3\xi^3+\dots$$

$$\boxed{H(\xi)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\xi^n}$$

نکته: معمولاً هر تابعی را می‌توان بسط چندجمله‌ای داد

* چنانچه a_n ها را پیدا کنیم ⟸ H را پیدا کرده‌ایم
* می‌توان بسط را به صورت زیر ترتیب کرد: ←

$$H(\xi)=(a_0+a_2\xi^2+a_4\xi^4+\dots)+(a_1\xi+a_3\xi^3+a_5\xi^5+\dots)$$
$$=H_{\text{زوج}}(\xi)+H_{\text{فرد}}(\xi)$$

۵

خواهیم دید که با بخش زوج H باقی می‌ماند و با بخش فرد H

بدنبال ضرایب a_n ها هستیم تا H را بیابیم. ← H در معادله

هرمیت صدق می‌کند ← آن را جایگذاری می‌کنیم

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\left(\sum_n a_n\xi^n\right)-2\xi\frac{d}{d\xi}\left(\sum_n a_n\xi^n\right)+\left(\frac{\lambda}{\alpha}-1\right)\left(\sum_n a_n\xi^n\right)=0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}a_n\,n(n-1)\xi^{n-2}-2\xi\sum_{n=0}^{\infty}a_n\,n\xi^{n-1}+\left(\frac{\lambda}{\alpha}-1\right)\sum_{n=0}^{\infty}a_n\xi^n=0$$

$$2\sum_{n=0}^{\infty}a_n\,n\,\xi^n$$

خودش ضرب

جمله $n=0$, $n=1$ را صفر می‌دهد

ζ پشت را به داخل جمع می‌بریم

$$\sum_{n=2}^{\infty}a_n\,n(n-1)\xi^{n-2}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}a_{n+2}(n+2)(n+1)\xi^n$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{(n+1)(n+2)a_{n+2}-2na_n+\left(\frac{\lambda}{\alpha}-1\right)a_n\right\}\xi^n=0$$

← این رابطه برای هر ξ باید برقرار باشد لذا عبارت داخل Σ باید صفر شود

4

عبارت داخل Σ با زیرین محدود شده را برابر صفر قرار می‌دهیم :

$$(n+1)(n+2)a_{n+2}+\left[\frac{\lambda}{\alpha}-(1+2n)\right]a_n=0$$

$$\boxed{a_{n+2}=-\frac{\frac{\lambda}{\alpha}-(1+2n)}{(n+1)(n+2)}\,a_n}$$

نکته : بین ضرایب a_n مطابق با رابطه فوق ارتباط داریم.

← اگر a_0 معلوم باشد ← a_2 معلوم می‌شود ← a_4 معلوم می‌شود ← ...

لذا با داشتن a_0 تمامی ضرایب زوج در بسط چندجمله‌ای H بدست می‌آیند

← اگر a_1 معلوم باشد ← a_3 معلوم می‌شود ← a_5 معلوم می‌شود ← ...

لذا با داشتن a_1 تمامی ضرایب فرد در بسط چندجمله‌ای H بدست می‌آیند

$$n=0 \Rightarrow a_2=-\frac{\frac{\lambda}{\alpha}-1}{2}\,a_0$$

$$n=2 \Rightarrow a_4=-\frac{\frac{\lambda}{\alpha}-5}{12}\,a_2=\frac{\left(\frac{\lambda}{\alpha}-5\right)\left(\frac{\lambda}{\alpha}-1\right)}{(12)(2)}\,a_0$$

$$\vdots$$

ضرایب زوج نه تنها به مقدار a_0 بلکه به ~~...~~ $\lambda \leftarrow (E)$ بستگی دارند.

λ ها گسسته اند لذا در a_n ها تأثیر دارند

$\boxed{7}$

مثلاً اگر $(\frac{\lambda}{\alpha}-1)=0$ باشد ⇐ طبق رابطه صفحه قبل

$$a_2=0$$
$$a_4=0$$
$$\vdots$$
$$a_{\text{زوج}}=0$$

به طور مشابه برای n های فرد ← a_1 معلوم

$$n=1 \longrightarrow a_3=-\frac{(\lambda/\alpha-3)}{6}a_1$$

$$n=3 \longrightarrow a_5=-\frac{(\frac{\lambda}{\alpha}-7)}{20}a_3=\frac{(\lambda/\alpha-3)(\frac{\lambda}{\alpha}-7)}{(6)(20)}a_1$$

لذا اگر a_1 را داشته باشیم بقیه a_n های فرد قابل محاسبه اند

اگر به طور مثال $\frac{\lambda}{\alpha}-3=0$ باشد ⇐ $a_3=0$, $a_5=0$, ... $a_{\text{فرد}}$ ها صفرند

جمع بندی ← a_0 , a_1 را با هم ← در حالت داریم

چون H باید یا زوج یا فرد باشد ←

$$\begin{cases} a_1=0\ ,\ a_0\neq 0 \Rightarrow H(\xi)=H_{\text{زوج}}(\xi) \\ a_1\neq 0\ ,\ a_0=0 \Rightarrow H(\xi)=H_{\text{فرد}}(\xi) \end{cases}$$

a_0, a_1 همزمان نمی‌توانند صفر یا همزمان غیرصفر باشند.

$\boxed{8}$

از آنجایی که تمامی ضرایب زوج را برحسب a_0 می‌توان نوشت لذا :

$$H_{\text{زوج}}(\xi) = a_0 \left\{ 1 - \frac{\left(\frac{\lambda}{\alpha}-1\right)}{2}\xi^2 + \frac{\left(\frac{\lambda}{\alpha}-5\right)\left(\frac{\lambda}{\alpha}-1\right)}{(12)(2)}\xi^4 + \cdots \right\}$$

که با توان‌های زوج ظاهر شده است

$$H_{\text{فرد}}(\xi) = a_1 \left\{ \xi - \frac{\left(\frac{\lambda}{\alpha}-3\right)}{6}\xi^3 + \frac{\left(\frac{\lambda}{\alpha}-3\right)\left(\frac{\lambda}{\alpha}-7\right)}{(6)(20)}\xi^5 + \cdots \right\}$$

که با توان‌های فرد ظاهر شده است.

پس جواب بخش H یا $H_{\text{زوج}}$ است یا $H_{\text{فرد}}$

اما : تابع موج رفتار حدی‌اش در هر دو حالت ایراد دارد چون باید

$$\lim_{|\xi|\to\infty} \psi(\xi) \longrightarrow \text{محدود}$$

اما اگر جملات مرتبه‌های بالاتر را در H نگاه کنیم این امر مشکل ایجاد خواهد کرد

باید داشته باشیم

$$\lim_{|\xi|\to\infty} GH \to \text{محدود} \Rightarrow \lim_{|\xi|\to\infty} e^{-\xi^2/2} H(\xi) \to \text{محدود}$$

لذا هرچند $\lim_{|\xi|\to\infty} e^{-\xi^2/2} \to 0$ اما باید جملات H از $|\xi|$ نمی‌توانند از ... باشند

$\boxed{9}$ تنها راه رفع این ایراد این است که تعداد جملات داخل H محدود باشد

مثال | تمرین: $H_{\text{زوج}}$ بینداریم

$$H_{\text{زوج}}(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + a_6\xi^6 + a_8\xi^8 + \cdots + a_{1000}\xi^{1000} + \cdots$$

از هر جمله‌ای بخواهیم صفر بشود بعدی‌ها زیرش می‌آیند ؟؟

$$H_{\text{زوج}}(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + 0 + 0 + \cdots + 0 + \cdots$$

اگر $a_6 = 0$ باشد $\Leftarrow a_8 = 0 \Leftarrow a_{10} = 0 \Leftarrow a_{\text{زوج}\, n>6} = 0$

اما a_6 چه زمانی صفر است (طبق فرمول ص 6)

$$n = 4 \rightarrow a_6 = -\frac{\frac{\lambda}{\alpha} - 9}{30} a_0$$

اگر قرار است سری زوج داشته باشیم $\Leftarrow$ a_0 نمی‌تواند صفر باشد

لذا تنها راه صفر شدن a_6 آن است که $\left(\frac{\lambda}{\alpha} - 9\right) = 0$

شود $\Leftarrow$ $\lambda = 9\alpha$

but $\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = 9m\frac{\omega}{\hbar} \Rightarrow \boxed{E = \frac{9}{2}\hbar\omega}$$

لذا انرژی گسسته خواهد بود همین مثال را می‌توان برای بقیه ضرایب و همچنین برای اتم H تکرار کرد

$\boxed{10}$

خلاصه : λ در حالت کلی گسسته است .

برای $a_1=0$ ، $a_0\neq 0$ مقادیر مجاز λ عبارتند از :

$$\frac{\lambda}{\alpha}=1 \leftarrow 0$$
$$\frac{\lambda}{\alpha}=5 \leftarrow 2$$
$$\frac{\lambda}{\alpha}=9 \leftarrow 4$$
$$\vdots$$

n های زوج

$$a_{n+2}=-\frac{\frac{\lambda}{\alpha}-(1+2n)}{(n+1)(n+2)}a_n$$

برای $a_0=0$ ، $a_1\neq 0$ مقادیر مجاز λ عبارتند از

$$\frac{\lambda}{\alpha}=3 \leftarrow 1$$
$$\frac{\lambda}{\alpha}=7 \leftarrow 3$$
$$\frac{\lambda}{\alpha}=11 \leftarrow 5$$

n های فرد

$$a_{n+2}=-\frac{\frac{\lambda}{\alpha}-(1+2n)}{(n+1)(n+2)}a_n$$

لذا

$$\alpha=\frac{m\omega}{\hbar} \text{ و } \lambda_n=\frac{2mE_n}{\hbar^2} \text{ و } \frac{\lambda_n}{\alpha}=(2n+1)$$

مثال

$$n=0 \rightarrow \frac{\lambda_n}{\alpha}=1 \Rightarrow \frac{\frac{2mE_0}{\hbar^2}}{\frac{m\omega}{\hbar}}=1 \Rightarrow E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$E_0=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+0\right)$$

$$n=1 \rightarrow \frac{\lambda_n}{\alpha}=3 \Rightarrow \frac{\frac{2mE_1}{\hbar^2}}{\frac{m\omega}{\hbar}}=3 \Rightarrow E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega \longrightarrow E_1=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+1\right)$$

$\boxed{11}$

لذا در حالت کلی ،

$$\frac{\lambda_n}{\alpha} = (2n+1) \longrightarrow E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

← اینها همان فرمول ترازهای مجاز انرژی (ویژه ترازهای هامیلتونی)

که از زمان قدیم پلانک بدست آورده بودیم

لذا خلاصه :

مثال : حالت پایه : $n=0$ ← زوج است

$$H(\xi) = H_{\text{زوج}}(\xi) = a_0 + \overbrace{a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots}^{\text{همه صفرند}}$$

$$H_0(\xi) = a_0 \longrightarrow$$ a_0 را 1 می‌گیریم

$$H_0(\xi) = 1$$

$$\psi_0(\xi) = A\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_0(\xi) = A\, e^{-\xi^2/2}$$

A ضریب نرمالیزاسیون ←

$$\boxed{\psi_0(\xi) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\; e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}} \qquad \boxed{E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}}$$

مثال | اولین حالت برانگیخته $n = 1$ ← فرد است

صفر هستند

$$H(\xi) = H_{\text{فرد}}(\xi) = a_1\xi + \underbrace{a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \cdots}$$

$$H_1(\xi) = a_1\xi \longrightarrow$$ a_1 را 2 می‌گیریم

$$\psi_1(\xi) = A e^{-\xi^2/2} H_1(\xi) = A e^{-\xi^2/2}(2\xi)$$

A ضریب بهنجارش را پیدا می‌کنیم، و ψ را برحسب x می‌نویسیم

تابع مرتبه اول از x

$$\boxed{\psi_1(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\sqrt{\frac{1}{2}}\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\left[2\sqrt{\alpha}\, x\right]} \qquad \boxed{E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega}$$

مثال | دومین حالت برانگیخته $n=2$ ← زوج

صفر هستند

$$H(\xi) = H_{\text{زوج}}(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + \underbrace{a_4\xi^4 + a_6\xi^6 + \cdots}$$

$$H_2(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 \longrightarrow$$ a_0 را -2 می‌گیریم لذا a_2 برابر 4 می‌شود

$$H_2(\xi) = -2 + 4\xi^2$$

$$\psi_2(\xi) = A e^{-\xi^2/2} H_2(\xi) = A e^{-\xi^2/2}(-2 + 4\xi^2)$$

$$\psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\sqrt{\frac{1}{8}}\, e^{-\alpha x^2/2}\left[4\alpha x^2 - 2\right]$$

تابع مرتبه دوم از x

$$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

۱۳

جمع بندی:

برای n مشخص

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} H_n(\sqrt{\alpha}\, x)$$

مقادیر a_1 یا a_0 در توابع هرمیت را به گونه‌ای تعیین کرده‌اند

که ثابت بهنجارش فرم کلی زیر را دارد

$$A_n = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}}$$

1

مکانیک کوانتومی در سه بعد

تعدد ← { سیستم اسپینی ← بعد آن می‌پردازیم
سیستم غیراسپینی ← به پتانسیل نگاه می‌کنیم ← درجات آزادی سیستم را مشخص می‌کنند }

$V(x) \longrightarrow$ یک بعدی   مثال / $\frac{1}{2}kx^2$

$V(x,y) \longrightarrow$ دو بعدی   مثال / $\frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2$

$V(r,\phi) \longrightarrow$ دو بعدی

$V(x,y,z) \longrightarrow$ سه بعدی

$V(r,\phi,\theta) \longrightarrow$ سه بعدی

هامیلتونی = انرژی پتانسیل + انرژی جنبشی

بعد از اینکه بعد مسئله را با نگاه به پتانسیل فهمیدیم، انرژی جنبشی متناسب با آن را انتخاب می‌کنیم.

مثال /
$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \Longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

$$V(x,y) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2 \Longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2$$

نکته، $V(x,y)$ یا $V(r,\varphi)$ یا $V(\varphi,z)$ و ... نمونه‌ای از پتانسیل‌های دو بعدی اند ← هامیلتونی را با یکی از دستگاه‌های مختصاتی بنویسیم که حل مسئله را راحت کند ← کارتزین، کروی، استوانه‌ای ...

۲

خصوصیات مسائل در سه بعد

← چنانچه پتانسیل محدود داشته باشد ← حالات مقید خواهیم داشت

← تابع باید در بی‌نهایت ψ محدود باشد

$$\lim_{\substack{x\to\infty \\ y\to\infty \\ z\to\infty}} \psi(x,y,z) \longrightarrow 0$$

← برای سامانه‌های مقید (انرژی گسسته):

در یک بعد تنها یک عدد کوانتومی داشتیم ← مثلاً n در چاه بی‌نهایت $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ ، n در نوسانگر $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

در سه بعد سه عدد کوانتومی داریم که حالت را مشخص می‌کنند

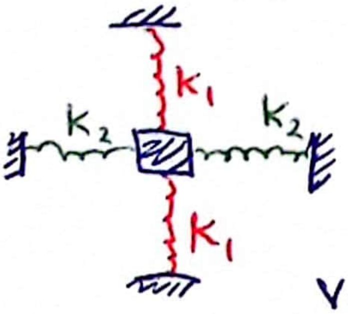
نتیجه: در سامانه 2 بعدی 2 عدد کوانتومی خواهیم داشت

← تبهگنی، ویژه توابع (انرژی برابر) با ویژه مقادیر یکسان

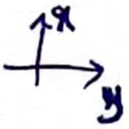
در مسائل ۲ بعدی و ۳ بعدی وجود حالات تبهگن بسیار محتمل است

← تقارن سیستم در این ابعاد است که به افزایش یا کاهش تبهگنی می‌انجامد

مثال ۱) نوسانگر دو بعدی → ناهمسانگرد ، همسانگرد

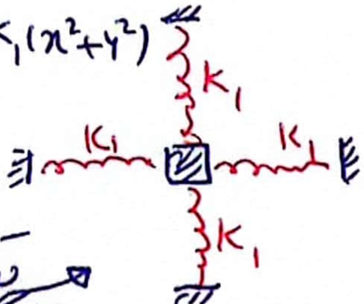


$$V = \frac{1}{2}k_1 x^2 + \frac{1}{2}k_2 y^2$$



همسانگرد تقارن بالاتری دارد نسبت به ناهمسانگرد

$$V = \frac{1}{2}k_1(x^2+y^2)$$



هر چه تعداد تبهگنی در سامانه‌ای بیشتر شود ← احتمال اینکه با حالت‌های تبهگن بیشتری سر و کار داشته باشیم بالا می‌رود.

۳

توجه: اگر چند حالت تبهگن را در نظر بگیریم ← احتمالاً رژیم محدود کار خواهند بود.

حل مسائل در سه بعد (دو بعد)

در یک بعد چه کار می‌کردیم؟ ← معادله شرودینگر یک بعدی

$$\hat H \psi = E\psi$$

$$\left[\frac{\hat p_x^2}{2m} + \hat V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

در دستگاه کارتزین نوشتیم

$$\hat p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \quad , \quad \hat V(x) \to V(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

از حل معادله ψ و E ها حساب می‌شوند

دو بعد ← کارتزین، کروی، استوانه‌ای

$$\hat P = \hat P_x\, \hat i + \hat P_y\, \hat j$$

$$\hat P^2 = \hat P_x^2 + \hat P_y^2$$

مثال ۱ کارتزین

$$\hat P_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \quad , \quad \hat P_y = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy} \Rightarrow \hat P^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} - \hbar^2\frac{d^2}{dy^2}$$

$$\hat V(x,y) \longrightarrow V(x,y)$$

۲ $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}+V(x,y)\right]\psi(x,y)=E\,\psi(x,y)$

از حل معادله E , ψ ها حاصل می‌شوند

* اگر مسئله مقید باشه E , ψ هر کدام دو اندیس (عدد کوانتمی) دارند

$$E_{m,n} \qquad \psi_{m,n}$$

سه بعدی ← کارتزین ، کروی ، استوانه‌ای

کارتزین / مثال

$$\hat P \rightarrow \hat P_x \hat i + \hat P_y \hat j + \hat P_z \hat k \equiv \frac{\hbar}{i}\vec\nabla$$

$$\hat P^2 = \hat P_x^2 + \hat P_y^2 + \hat P_z^2 = -\hbar^2 \nabla^2_{\text{کارتزین}}$$

$$\hat V(x,y,z) \longrightarrow V(x,y,z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)\right]\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z)$$

لاپلاسین در دستگاه کارتزین

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)$$

از حل معادله ψ , E ها حاصل می‌شوند

اگر مقید باشه (که در مثال های ما همواره اینچنین است) E , ψ سه اندیس دارند

برای حل کردن مسئله در دستگاه کروی، باید بنویسیم و لاپلاسین را در دستگاه کروی بنویسیم

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\text{کروی}} + V(r,\theta,\varphi)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\,\psi(r,\theta,\varphi)$$

به طور مشابه برای دستگاه استوانه‌ای:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\text{استوانه‌ای}} + V(\rho,\varphi,z)\right]\psi(\rho,\varphi,z) = E\,\psi(\rho,\varphi,z)$$

۴۵

مسائل سه بعدی که ما در این درس می‌خوانیم

ذره آزاد - ذره در جعبه - نوسانگر - اتم هیدروژن

غیرمقید (انرژی پیوسته) | مقید (انرژی گسسته)

ذره آزاد در سه بعد:

مسئله را در دستگاه کارتزین حل می‌کنیم.

(حل مسئله در دستگاه کروی را به عنوان تمرین انجام دهید. البته چند هفته دیگر تمرین دهید)

$$V(x,y,z)=0 \longrightarrow \hat{H}\psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+0\right]\psi=E\psi$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\psi(x,y,z)=E\,\psi(x,y,z)} \quad (1)$$

نکته: هر جا پتانسیل نسبت به x و y و z به صورت مستقل مطرح شده باشد آنگاه ψ را می‌توان به صورت ضربی نوشت:

$$\psi(x,y,z)\longrightarrow X(x)\,Y(y)\,Z(z)$$

مثال:

غیرمستقل | مستقل

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}xy+z^2$$

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}ky^2+\frac{k}{2}z^2$$

$$V(x,y,z)=0$$

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}ky^2+\frac{1}{2}kz^2+kxy$$

چون پتانسیل ذره آزاد به گونه‌ای است که می‌توان آن را به صورت تفکیک‌پذیر نوشت

از رابطه ① داریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(XYZ)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}(XYZ)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}(XYZ)=E\,XYZ$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}YZ\frac{d^2X}{dx^2}-\frac{\hbar^2}{2m}XZ\frac{d^2Y}{dy^2}-\frac{\hbar^2}{2m}XY\frac{d^2Z}{dz^2}=E\,XYZ$$

$$\xrightarrow[\times\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)]{\div XYZ}\quad \frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\equiv -k^2$$

تابعی از x + تابعی از y + تابعی از z = عدد

جمع 3 تابع مستقل از هم ثابت است یعنی عدد است پس تک تک آنها ثابتند

$$(-k_x^2)+(-k_y^2)+(-k_z^2)=-k^2$$

با ثابت بودن k_x, k_y, k_z چرا اینها هستند

$$\longrightarrow k^2=k_x^2+k_y^2+k_z^2$$

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X(x)}{dx^2}=-k_x^2 \longrightarrow X(x) \begin{cases} e^{ik_xx} \\ e^{-ik_xx}\end{cases} (k_x>0) \rightarrow e^{ik_xx} \quad -\infty<k_x<+\infty$$

$$\frac{1}{Y}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}=-k_y^2 \longrightarrow Y(y) \begin{cases} e^{ik_yy} \\ e^{-ik_yy}\end{cases} (k_y>0) \rightarrow e^{ik_yy} \quad -\infty<k_y<\infty$$

$$\frac{1}{Z}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}=-k_z^2 \longrightarrow Z(z) \begin{cases} e^{ik_zz} \\ e^{-ik_zz}\end{cases} (k_z>0) \rightarrow e^{ik_zz} \quad -\infty<k_z<\infty$$

$$\psi(x,y,z)\sim e^{ik_xx}\,e^{ik_yy}\,e^{ik_zz}$$

از آنجایی که k_x, k_y, k_z پیوسته هستند: طیف انرژی پیوسته است

$$\psi(x,y,z) \sim e^{i[k_x x + k_y y + k_z z]}$$

بعداً که ψ را نرمالیزه کردیم درست می‌شود

but
$$\begin{cases} \bar{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k} \\ \bar{K} = k_x\hat{i} + k_y\hat{j} + k_z\hat{k} \end{cases}$$

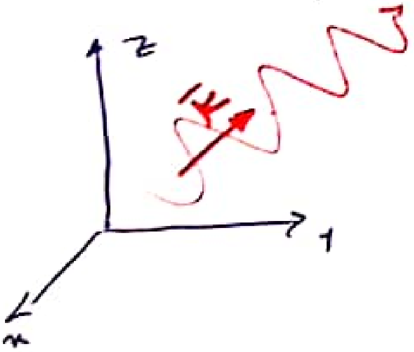
$$\begin{cases} \psi(x,y,z) \sim e^{i\bar{K}\cdot\bar{r}} \\ E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{cases} \quad , \ |K| = k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$$

نکات

* K عدد موج است.

* چون قیدی روی انرژی پیدا نشد لذا طیف انرژی پیوسته است و حالات غیرمقید هستند

* موج $\psi(x,y,z)$ که پیدا کردیم موجی تخت است که در جهت $\bar{K}$ انتشار می‌یابد



لذا:

$$\psi(x,y,z) = Ae^{i\bar{K}\cdot\bar{r}}$$

چگالی جریان:

یک بعدی: $\psi(x) = Ae^{ikx} \Rightarrow J(x) = |A|^2 \dfrac{\hbar k}{m}$

سه بعدی: $\psi(x,y,z) = Ae^{i\bar{K}\cdot\bar{r}} \Rightarrow \bar{J}(\bar{r}) = |A|^2 \dfrac{\hbar \bar{K}}{m}$

تمرین: اصلاً A را چرا می‌گذاریم؟؟

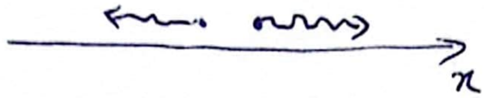
از فرمول $\bar{J} = -\dfrac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\bar{\nabla}\psi - \psi\bar{\nabla}\psi^*\right)$ محاسبه کنید

۸

تمرین: نرمال ψ در سه بعد را که در صفحه قبل آورده‌ایم اثبات کنید.

تبهگنی، اینجا مسئله تبهگنی دارد

در یک بعد: موج روی خط



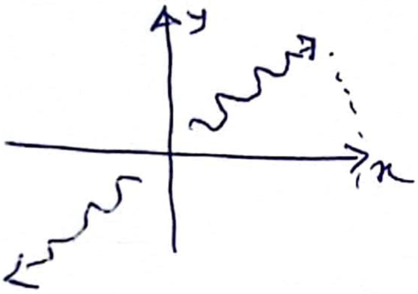
k_x مثبت ← ذره به سمت راست

k_x منفی ← ذره به سمت چپ

$E=\frac{\hbar^2k_x^2}{2m}$ ← انرژی هر دو حالت یکسان است

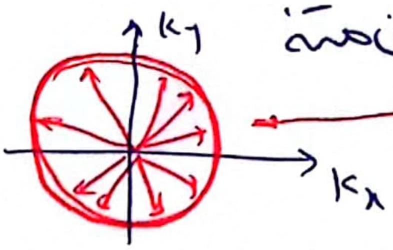
تبهگنی مرتبه 2

در دو بعد: موج در صفحه xy

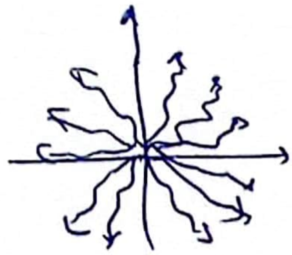


$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2)$$

تمام حالت‌هایی که $k_x^2+k_y^2$ در آنها یکی باشد ← تبهگن هستند



$$\psi(x,y)=A\,e^{i(k_xx+k_yy)}$$



موج می‌تواند در جهات مختلف در صفحه xy داشته باشیم

امواجی که قید بالا را دارند ← تبهگن هستند

تبهگنی مرتبه بی‌نهایت است. ← بی‌انتها بردار موج روی دایره به شعاع $K^2=k_x^2+k_y^2$ است

9//

به طور مشابه، در سه بعد تبهگنی مرتبه بی‌نهایت داریم

$$\psi = A e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})} = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

توابع موجی که E آنها یکسان باشد تبهگن هستند

سوال: دو تابع موج تبهگن در سه بعد برای ذره آزاد مثال بزنید

$k_x = 1 \;,\; k_y = 2 \;,\; k_z = 5$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(1^2 + 2^2 + 5^2) = \frac{30\hbar^2}{2m}$$

$$\boxed{\psi(x,y,z) = A e^{i(x+2y+5z)}}$$

$k_x = 2 \;,\; k_y = 5 \;,\; k_z = 1$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(2^2 + 5^2 + 1^2) = \frac{30\hbar^2}{2m}$$

$$\boxed{\psi(x,y,z) = A e^{i(2x+5y+z)}}$$

این دو تابع موج تبهگن هستند چون انرژی یکسان دارند

* بی‌نهایت تابع موج می‌توان مثال زد که همین انرژی را دارند

کافیست k_x، k_y، k_z به گونه‌ای باشند که

$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = 30$

۱۰

نشان دهید ویژه بردارهای ذره آزاد، ویژه بردارهای عملگر تکانه خطی هستند

راه اول

$$[\hat{H}, \hat{P}] = [\hat{H}, \hat{P}_x \hat{i} + \hat{P}_y \hat{j} + \hat{P}_z \hat{k}]$$

$$= \left[\frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_y^2}{2m} + \frac{\hat{P}_z^2}{2m}, \hat{P}_x \hat{i} + \hat{P}_y \hat{j} + \hat{P}_z \hat{k}\right] = 0$$

لذا ویژه بردارهای هامیلتونین، ویژه بردارهای تکانه خطی هستند

راه دوم

$$\hat{P}\psi = ?!$$

$$\hat{P}\psi(x,y,z) = +\frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}\psi(\bar{r})$$

$$= +\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k}\right)e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

$$= \hbar(\hat{i}k_x + \hat{j}k_y + \hat{k}k_z)\psi$$

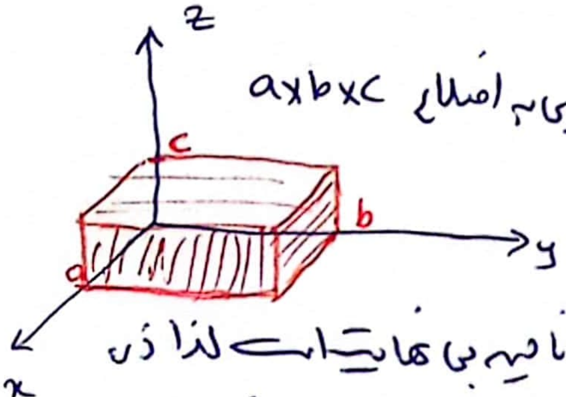
$$\Longleftarrow$$

$$\hat{P}\psi = \hbar\bar{k}\psi$$

لذا ψ ویژه بردار $\hat{P}$ است با ویژه مقدار $\hbar\bar{k}$

ذره در جعبه سه بعدی

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0 & (0<x<a),\ (0<y<b),\ (0<z<c)\\ \infty & \text{else}\end{cases}$$



ذره‌ای محصور در مکعبی به اضلاع $a\times b\times c$

* پتانسیل در خارج از این ناحیه بی‌نهایت است لذا ذره نمی‌تواند خارج از این ناحیه حضور داشته باشد.

* در داخل این ناحیه پتانسیل صفر است ← از لحاظ فیزیکی می‌توان با تقریبی بسیار رسانا که شکل مکعب مستطیل دارد را الکترون آزادانه داخل آن حرکت می‌کند، تقریب زد.

ادامه حل مسئله در صفحه بعد

تمرین: مسائل زیر را خودتان حل کنید.

* ۱ جعبه را در دو بعد هم مثال بزنید و حل کنید

~~سه بعدی~~

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0 & \left(-\frac{a}{2}<x<\frac{a}{2}\right),\ \left(-\frac{b}{2}<y<\frac{b}{2}\right),\ \left(-\frac{c}{2}<z<\frac{c}{2}\right)\\ \infty & \text{else}\end{cases}$$

$$V(\vec{r})=\begin{cases}0 & |r|<R\\ \infty & |r|>R\end{cases}$$

→ این مسئله بایستی در دستگاه کروی حل شود (به جلسات بعد موکول کنید)

۱۲

چون در هر سه امتداد محدودیت داریم (پتانسیل محدودکننده است)

لذا انتظار داریم $\underbrace{\text{انرژی گسسته باشه}}_{\text{۳ عدد کوانتومی}}$ و $\underbrace{\text{حالات مقید باشند}}_{\text{چگالی جریان صفر باشه}}$

چون V در خارج جعبه ∞ است $\longleftrightarrow$ $\psi_{\text{خارج}}(x,y,z) = 0$

$$\psi_{\text{داخل}}(x,y,z) \xrightarrow[\text{قرار می‌دهیم}]{\text{در معادله شرودینگر}} \hat{H}\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\psi_{\text{داخل}}(x,y,z) + \cancel{V(x,y,z)\,\psi_{\text{داخل}}(x,y,z)} = E\,\psi_{\text{داخل}}(x,y,z)$$

پتانسیل داخل جعبه صفر است

(در ادامه از نوشتن اندیس داخل برای ψ خودداری می‌کنیم)

چون x, y, z در پتانسیل مستقل هستند

$$\psi(x,y,z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[YZ\frac{d^2X}{dx^2}+XZ\frac{d^2Y}{dy^2}+XY\frac{d^2Z}{dz^2}\right] = EXYZ$$

$$\xrightarrow[\times\,(-2m/\hbar^2)]{\div\, XYZ}$$

ادامه صفحه بعد

۱۳

$$\frac{1}{X_{(x)}}\frac{d^2X_{(x)}}{dx^2}+\frac{1}{Y_{(y)}}\frac{d^2Y_{(y)}}{dy^2}+\frac{1}{Z_{(z)}}\frac{d^2Z_{(z)}}{dz^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}=-k^2$$

x تابع + y تابع + z تابع = ثابت

$$=-k_x^2 \qquad =-k_y^2 \qquad =-k_z^2$$

پس، $k_x^2+k_y^2+k_z^2=k^2$ بهم مرتبطند،

جواب معادلات داشته‌ایم ← در تمرین‌ها

$$\begin{cases}\dfrac{1}{X}\dfrac{d^2X}{dx^2}=-k_x^2 \longrightarrow X(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n_x\pi}{a}x\\[2ex] \dfrac{1}{Y}\dfrac{d^2Y}{dy^2}=-k_y^2 \longrightarrow Y(y)=\sqrt{\dfrac{2}{b}}\sin\dfrac{n_y\pi}{b}y\\[2ex] \dfrac{1}{Z}\dfrac{d^2Z}{dz^2}=-k_z^2 \longrightarrow Z(z)=\sqrt{\dfrac{2}{c}}\sin\dfrac{n_z\pi}{c}z\end{cases}$$

پس

$$k_z=\frac{n_z\pi}{c}\ ,\quad k_y=\frac{n_y\pi}{b}\ ,\quad k_x=\frac{n_x\pi}{a}$$

n_x ، n_y ، n_z اعداد صحیح و مثبت هستند (از یک شروع می‌شوند)

$$n_x, n_y, n_z > 0$$

سه عدد کوانتومی ← همانطور که انتظار داشتیم

پس/

$$\begin{cases}\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z)=\sqrt{\dfrac{8}{abc}}\sin\dfrac{n_x\pi}{a}x\,\sin\dfrac{n_y\pi}{b}y\,\sin\dfrac{n_z\pi}{c}z\\[2ex] E=\dfrac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\longrightarrow E_{n_x,n_y,n_z}=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{n_x^2}{a^2}+\dfrac{n_y^2}{b^2}+\dfrac{n_z^2}{c^2}\right)\end{cases}$$

حجم جعبه

۱۴

حالت پایه: $(n_x=1, n_y=1, n_z=1)$

کت حالت: $|1,1,1\rangle$

تابع موج $\psi_{111}(x,y,z) = \langle x,y,z|111\rangle$

$$= \sqrt{\frac{8}{V}} \sin\frac{\pi}{a}x \, \sin\frac{\pi}{b}y \, \sin\frac{\pi}{c}z$$

$V=abc$ حجم جعبه

$$E_{111} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)$$

احتمال حضور ذره در مرکز جعبه از همه جا بیشتر است.

تمرین: ذره‌ای در حالت پایه جعبه سه بعدی با مشخصات فوق است

الف) $\langle \hat{H} \rangle$ را حساب کنید

ب) $\langle \hat{x} \rangle$ را حساب کنید

ج) $\langle \hat{y} \rangle$ را حساب کنید

د) $\langle \hat{p}_x \rangle$ را حساب کنید

و) $\langle \hat{p}_z \rangle$ را حساب کنید

ه) نشان دهید احتمال حضور ذره در مرکز جعبه از همه جا بیشتر است

ی) نشان دهید چگالی جریان تابع موج ذره برابر صفر است. را حساب کنید

۱۵

اولین حالت برانگیخته ← حالتی که انرژی آن بعد از حالت پایه است ← به ابعاد a، b، c بستگی دارد

چنانچه $a<b<c$ باشد

انرژی حالت بعدی خواهد بود

$$E_{112}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{4}{c^2}\right)$$

$$\psi_{112}=\sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{\pi}{a}x\,\sin\frac{\pi}{b}y\,\sin\frac{2\pi}{c}z$$

و حالت‌های بعدی به ترتیب ψ_{121} ، ψ_{211} خواهند بود

چنانچه $a>b>c$

$$E_{211}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{4}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)$$

$$\psi_{211}=\sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{2\pi}{a}x\,\sin\frac{\pi}{b}y\,\sin\frac{\pi}{c}z$$

و حالت‌های بعدی به ترتیب ψ_{121} ، ψ_{112} خواهند بود

حالت خاص، ذره محصور در جعبه مکعبی

$$a=b=c$$

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x\,\sin\frac{n_y\pi}{a}y\,\sin\frac{n_z\pi}{a}z$$

$$E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{a^2}+\frac{n_z^2}{a^2}\right)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$$

حالت پایه

16

$$|111\rangle \rightarrow \psi_{111}(\bar{r}) = \sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{\pi}{a}x\,\sin\frac{\pi}{a}y\,\sin\frac{\pi}{a}z \qquad \rightarrow \boxed{V=a^3}$$

$$E_{111} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1^2+1^2+1^2) = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

اولین حالت برانگیخته ← تبهگنی مرتبه 3 دارد

$$\begin{cases} |211\rangle \rightarrow \psi_{211}(\bar{r}) = \sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{2\pi}{a}x\,\sin\frac{\pi}{a}y\,\sin\frac{\pi}{a}z \\ |121\rangle \rightarrow \psi_{121}(\bar{r}) = \sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{\pi}{a}x\,\sin\frac{2\pi}{a}y\,\sin\frac{\pi}{a}z \\ |112\rangle \rightarrow \psi_{112}(\bar{r}) = \sqrt{\frac{8}{V}}\sin\frac{\pi}{a}x\,\sin\frac{\pi}{a}y\,\sin\frac{2\pi}{a}z \end{cases}$$

$$\left.\begin{aligned} E_{211} &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2^2+1^2+1^2) = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \\ E_{121} &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1^2+2^2+1^2) = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \\ E_{112} &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1^2+1^2+2^2) = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \end{aligned}\right\}$$

هر سه حالت انرژی یکسان دارند

* هر چه به ترازهای بالاتر (انرژی‌های بیشتر) برویم تبهگنی ترازها بیشتر می‌شود

تمرین: دومین حالت برانگیخته این سیستم را پیدا کنید و تبهگنی آن را بدست آورید

جمع بندی

انرژی E

دومین حالت برانگیخته → محل جواب شما

اولین حالت برانگیخته: $|211\rangle, |121\rangle, |112\rangle \quad E = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

حالت پایه: $|111\rangle \quad E_{111} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

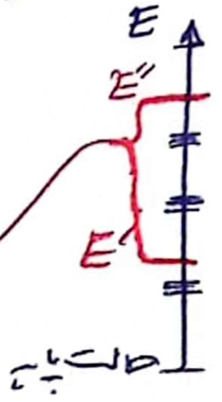
۱۷

چگالی حالات $\rho(E)$.

تعریف: $\rho(E)\,dE$ تعداد حالاتی را که انرژی بین E و $E+dE$ را دارند (است).

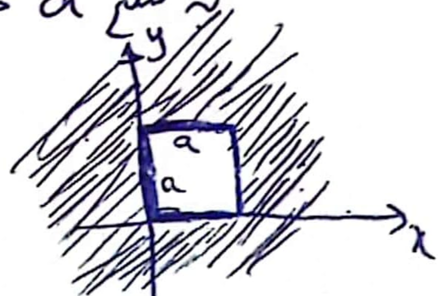
لذا: تعداد حالاتی که انرژی بین E' و E'' را دارند خواهد شد:

$$\text{تعداد حالات} = \int_{E'}^{E''} \rho(E)\,dE$$



مثال: چگالی حالات را برای ذره محبوس در ناحیه دوبعدی به ضلع a حساب کنید.

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & (0<x<a),\ (0<y<a) \\ \infty & \text{else} \end{cases}$$



با حل مسئله (تمرین) خواهیم داشت:

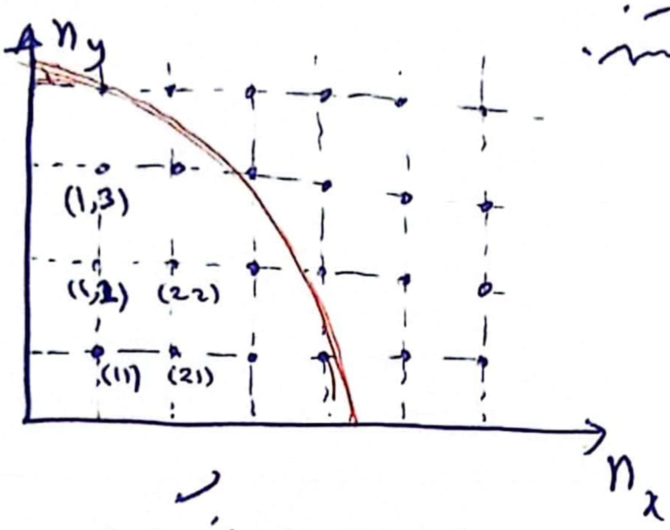
$$\psi_{n_x,n_y}(x,y) = \sqrt{\frac{4}{a^2}}\,\sin\frac{n_x\pi}{a}x\,\sin\frac{n_y\pi}{a}y$$

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2+n_y^2\right)$$

تمرین کنید

$$n_x^2+n_y^2=n^2$$

بنابراین تمام حالاتی که $(|n_x,n_y\rangle)$ در آنجا $n_x^2+n_y^2$ برابر n^2 شود تبهگن هستند.



$n_x^2+n_y^2=n^2$

نکات

فضای گسسته $(n_x,n_y>0)$ فوق را در نظر بگیرید

* هر نقطه در این فضا معادل یکی از حالات است

مثلاً $(1,1)$:

$n_x=1\;,\;n_y=1$

$$\psi_{11}=\sqrt{\frac{4}{a^2}}\sin\frac{\pi}{a}x\,\sin\frac{\pi}{a}y \qquad E_{11}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1^2+1^2)=\frac{2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

مثلاً $(1,3)$:

$n_x=1\;,\;n_y=3$

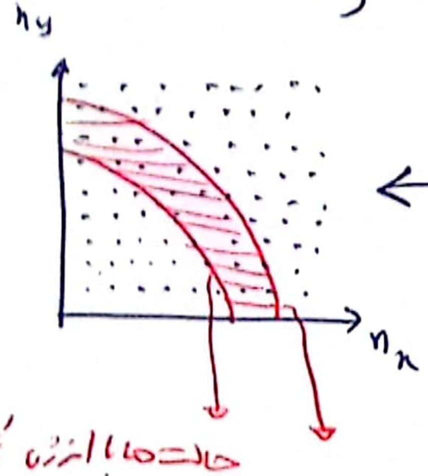
$$\psi_{13}=\sqrt{\frac{4}{a^2}}\sin\frac{\pi}{a}x\,\sin\frac{3\pi}{a}y \qquad E_{13}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1^2+3^2)=\frac{10\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

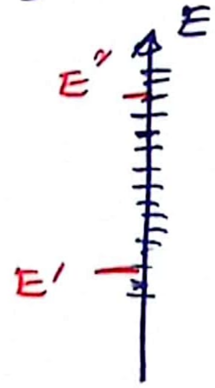
* حالت هایی که روی دایره به شعاع n هستند انرژی یکسانی دارند

هر قدر n بزرگتر شود تعداد حالت هایی که روی این دایره قرار می‌گیرند بیشتر خواهد شد $\Leftarrow$ تبهگنی بالاتری دارد.

19

تعداد حالاتی که انرژی بین E' و E'' دارند چقدر است.





$$\underset{E'<E<E''\ \text{با انرژی}}{\text{تعداد حالات}} = \sum_{n_y, n_x} \text{تعداد حالات داخل ناحیه فوق} \simeq \iint_{\text{ناحیه فوق}} dn_x\, dn_y$$

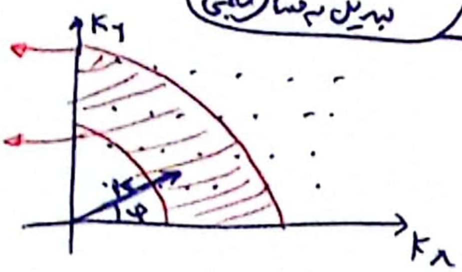
but $k_x = \dfrac{n_x \pi}{a}$, $k_y = \dfrac{n_y \pi}{a}$

$$dk_x = \frac{\pi}{a} dn_x \qquad dk_y = \frac{\pi}{a} dn_y$$

$$dn_x = \frac{a}{\pi} dk_x \qquad dn_y = \frac{a}{\pi} dk_y$$

$$\text{تعداد حالات} = \overset{\text{مساحت جعبه دو بعدی}}{\frac{a^2}{\pi^2}} \underbrace{\iint dk_x\, dk_y}_{\text{تبدیل به قطبی}} = \frac{S}{\pi^2}\int d^2k = \frac{S}{\pi^2}\iint k\,dk\,d\varphi$$

روی ناحیه هاشور خورده



تعداد حالات $= \frac{S}{\pi^2}\frac{2\pi}{4}\int_{k'}^{k''} k\,dk$

$\int d\varphi^{\pi/2}$

۲۰

but $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\,E^{1/2}=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sqrt{E}$

$dk=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\,\frac{dE}{2\sqrt{E}}$

K و dk را در معادله فوق قرار می‌دهیم

تعداد حالات $= \frac{S}{\pi^2}\frac{\pi}{2}\int_{E=E'}^{E=E''}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\,\frac{dE}{2\sqrt{E}}$

حدود را داریم

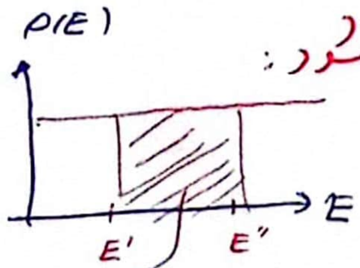
تعداد حالات $= \frac{mS}{2\pi\hbar^2}\int_{E'}^{E''} dE$

اما از طرفی طبق تعریف داشتیم

تعداد حالات $= \int_{E'}^{E''}\rho(E)\,dE$

از مقایسه اینها در عبارت چگالی حالات برای ذره در جعبه دوبعدی می‌شود:

$\rho(E)=\frac{mS}{2\pi\hbar^2}$ مشخص می‌شود



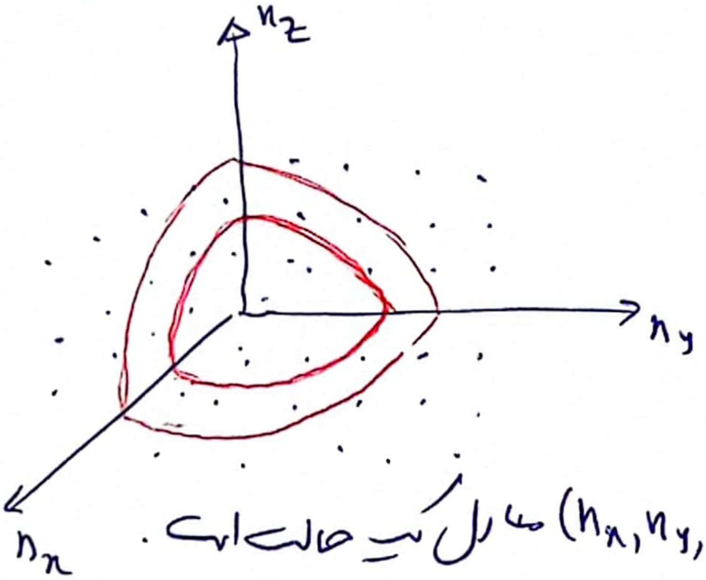
از این مساحت‌ها می‌رسیم تعداد حالات

* چگالی حالات عدد ثابتی است.

۲۱ چگالی حالت برای ذره در مکعب (ذره در جعبه سه بعدی)

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right) = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$n^2 = n_x^2+n_y^2+n_z^2 \qquad (n_x,n_y,n_z>0)$$



ناحیه سه بعدی حجم در نظر می‌گیریم

- هر نقطه در این فضا (n_x,n_y,n_z) معادل یک حالت است.
- فاصله هر نقطه تا مبدأ $n=\sqrt{n_x^2+n_y^2+n_z^2}$
- نقاطی که فاصله یکسانی از مبدأ دارند انرژی یکسانی دارند

* محاسبه چگالی حالات.

تعداد حالات با انرژی بین E' و E'' $= \sum_{n_z,n_y,n_x}$ حالات محصور در پوسته کروی شکل بالا

* پوسته داخلی معرف نقاطی است که انرژی E' دارند

* پوسته خارجی معرف نقاطی است که انرژی E'' دارند

$$= \int dn_x\, dn_y\, dn_z$$

۲۲

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a} \qquad k_y = \frac{n_y \pi}{a} \qquad k_z = \frac{n_z \pi}{a}$$

$$dn_x = \frac{a}{\pi} dk_x \qquad dn_y = \frac{a}{\pi} dk_y \qquad dn_z = \frac{a}{\pi} dk_z$$

حجم جعبه

$$\text{تعداد حالات} = \frac{a^3}{\pi^3} \iiint dk_x\, dk_y\, dk_z$$

$$= \frac{V}{\pi^3} \int d^3k$$

انتگرال را در دستگاه کروی می‌نویسیم

$$= \frac{V}{\pi^3} \int_{\pi'=0}^{\pi''} \int_{\theta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{\pi/2} k^2 dk \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \frac{V}{\pi^3} \int_{k'}^{k''} k^2 dk \int d\Omega$$

زاویه فضایی

$$= \frac{V}{\pi^3} \frac{4\pi}{8} \int k^2 dk$$

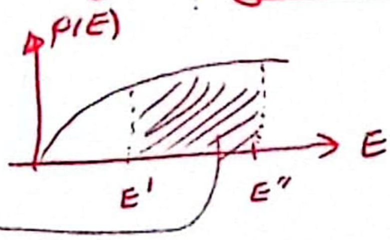
$$\text{تعداد حالات} = \frac{V}{2\pi^2} \int k^2 dk$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \rightarrow dk = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{dE}{\sqrt{E}}$$

$$\text{حالات} = \frac{V}{2\pi^2} \int \frac{(2m)^{3/2}}{2\hbar^3} \sqrt{E}\, dE$$

با مشتق‌گیری نسبت اول

$$\rho(E) = \frac{(2m)^{3/2} V}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$



چنانچه مساحت را حساب کنیم تعداد حالات = حجم جعبه ...

تمرین ، ویژه حالات انرژی ذره در جعبه یک بعدی حساب کنید.

تمرین : تابع موج ذره ای در جعبه سه بعدی به صورت زیر است

$$\psi(x,y,z) = \frac{3}{5}\psi_{111} + \frac{4}{5}\psi_{121}$$

الف) تابع موج را نرمالیزه کنید

ب) $\langle \hat{H} \rangle$ را حساب کنید

ج) $\langle \hat{T} \rangle$ را حساب کنید

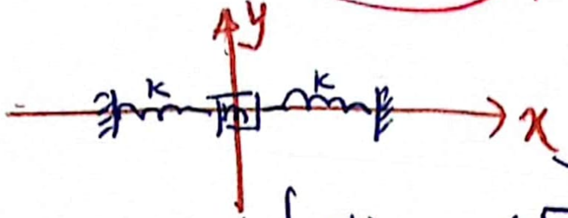
د) $\langle \hat{x} \rangle$ را حساب کنید

و) $\langle \hat{p}_x \rangle$ را حساب کنید

هـ) احتمال اینکه در اندازه گیری انرژی مقدار $\frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ بدست آید چقدر است

نوسانگر کوانتومی سه بعدی

اتم ها نسبت به یکدیگر در کریستال ← ارتعاشاتی دارند (به دمای سامانه بستگی دارد) که می توان این ارتعاشات را با نوسانگر سه بعدی تشبیه زد



یادآوری ← نوسانگر یک بعدی

$$\begin{cases} \psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} H_n(\sqrt{\alpha}\, x) \\ E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \end{cases} \qquad \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

نوسانگر سه بعدی ← همسانگرد ، ناهمسانگرد

همسانگرد:

کروی: $V(\vec{r}) = \frac{1}{2} k r^2$

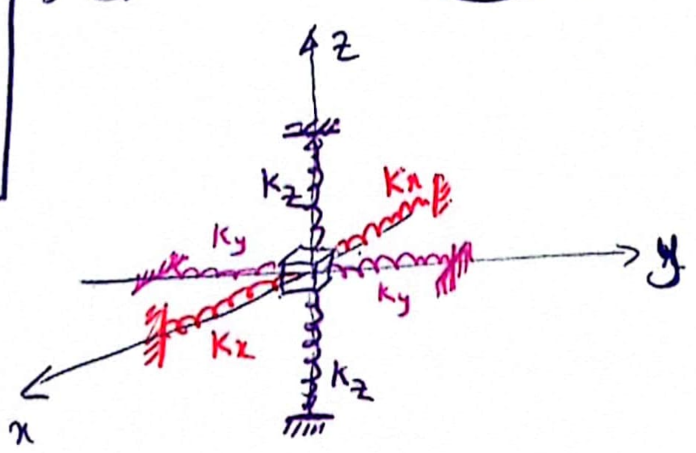
کارتزین ✓: $V(\vec{r}) = \frac{1}{2} k x^2 + \frac{1}{2} k y^2 + \frac{1}{2} k z^2$

ناهمسانگرد:

کارتزین ✓: $V(\vec{r}) = \frac{1}{2} k_x x^2 + \frac{1}{2} k_y y^2 + \frac{1}{2} k_z z^2$

استوانه‌ای: $V(\rho, z) = \frac{1}{2} k_\rho \rho^2 + \frac{1}{2} k_z z^2$

نوسانگر سه بعدی ناهمسانگرد در دستگاه کارتزین



$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2 + \frac{1}{2}k_z z^2$$

۲

تعریف $\begin{cases} \omega_x = \sqrt{\dfrac{k_x}{m}} & \text{فرکانس نوسان در راستای } x \\ \omega_y = \sqrt{\dfrac{k_y}{m}} & y \text{ ״ ״ ״} \\ \omega_z = \sqrt{\dfrac{k_z}{m}} & z \text{ ״ ״ ״} \end{cases}$

لذا:

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2$$

معادله شرودینگر

$$\hat{H}\psi(x,y,z) = \epsilon\,\psi(x,y,z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = \epsilon\,\psi(x,y,z)$$

پتانسیل در سه راستا مستقل از یکدیگر ← تفکیک ψ

$$\psi(x,y,z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(YZ\frac{d^2X}{dx^2} + XZ\frac{d^2Y}{dy^2} + XY\frac{d^2Z}{dz^2}\right) + \left(\frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2\right)XYZ$$

$$= \epsilon XYZ$$

$$\xrightarrow[\times\, \frac{2m}{\hbar^2}]{\div XYZ}$$ صفحه بعد

$$\underbrace{-\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{m^2\omega_x^2}{\hbar^2}x^2}_{x\text{ تابع }}\ \underbrace{-\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{m^2\omega_y^2}{\hbar^2}y^2}_{y\text{ تابع }}\ \underbrace{-\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}+\frac{m^2\omega_z^2}{\hbar^2}z^2}_{z\text{ تابع }}=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

۳

$$\frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon_x+\epsilon_y+\epsilon_z)$$

تابع x

$$\left(-\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{m\omega_x^2}{\hbar^2}x^2-\frac{2m\epsilon_x}{\hbar^2}\right)\left(-\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{m\omega_y^2}{\hbar^2}y^2-\frac{2m\epsilon_y}{\hbar^2}\right)$$

تابع y

$$\left(-\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}+\frac{m\omega_z^2}{\hbar^2}z^2-\frac{2m\epsilon_z}{\hbar^2}\right)=0$$

تابع z

عبارت فوق به ازای هر x و y و z باید برقرار باشد لذا
هر بخش باید جداگانه صفر شود

← سه معادله داریم ← هر سه معادله مانند نوسانگر ساده یک بعدی

$$X_{n_x}(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha_x}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2^{n_x}n_x!}}e^{-\frac{\alpha_x x^2}{2}}H_{n_x}(\sqrt{\alpha_x}\,x)\quad,\ \epsilon_x=(n_x+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_x$$

$$Y_{n_y}(y)=\sqrt[4]{\frac{\alpha_y}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2^{n_y}n_y!}}e^{-\frac{\alpha_y y^2}{2}}H_{n_y}(\sqrt{\alpha_y}\,y)\quad,\ \epsilon_y=(n_y+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_y$$

$$Z_{n_z}(z)=\sqrt[4]{\frac{\alpha_z}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2^{n_z}n_z!}}e^{-\frac{\alpha_z z^2}{2}}H_{n_z}(\sqrt{\alpha_z}\,z)\quad,\ \epsilon_z=(n_z+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_z$$

$$\begin{cases} \psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \sqrt[4]{\dfrac{\alpha_x\alpha_y\alpha_z}{\pi^3}}\,\dfrac{1}{\sqrt{2^{n_x+n_y+n_z}\,n_x!\,n_y!\,n_z!}}\,H_{n_x}(\sqrt{\alpha_x}\,x)\,H_{n_y}(\sqrt{\alpha_y}\,y)\,H_{n_z}(\sqrt{\alpha_z}\,z)\,e^{\frac{-\alpha_x x^2-\alpha_y y^2-\alpha_z z^2}{2}} \\[2ex] \epsilon_{n_x,n_y,n_z} = (n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y+\frac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z+\frac{1}{2})\hbar\omega_z \end{cases}$$

توجه $\omega_x \neq \omega_y \neq \omega_z$ نوسانگر کاملاً ناهمسانگرد

$\omega_x = \omega_y = \omega_z$ نوسانگر همسانگرد

نوسانگر ناهمسانگرد ← حالت پایه

$n_x = 0 \quad , \quad n_y = 0 \quad , \quad n_z = 0$

* اعداد کوانتومی نوسانگر همواره از صفر شروع می‌شوند

$$\langle x,y,z|0\,0\,0\rangle \Rightarrow \psi_{000}(x,y,z) = \sqrt[4]{\frac{\alpha_x\alpha_y\alpha_z}{\pi^3}}\; e^{-\left(\frac{\alpha_x x^2+\alpha_y y^2+\alpha_z z^2}{2}\right)}$$

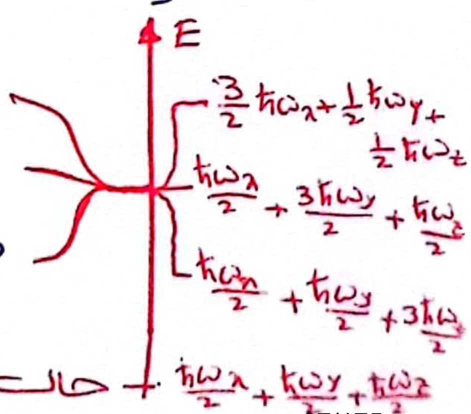
$$\epsilon_{000} = \frac{\hbar\omega_x}{2} + \frac{\hbar\omega_y}{2} + \frac{\hbar\omega_z}{2} \longrightarrow$$

تبهگنی ندارد

اولین حالت برانگیخته (چنانچه ω ها از یک مرتبه باشند)

آنگاه یکی از حالات زیر را می‌توان اولین حالت برانگیخته خواند

$$\begin{cases} n_x = 1 \quad , n_y = 0 , \quad n_z = 0 \longrightarrow |1\,0\,0\rangle \\ n_x = 0 \quad , n_y = 1 \quad , n_z = 0 \longrightarrow |0\,1\,0\rangle \\ n_x = 0 \quad , n_y = 0 \quad , n_z = 1 \longrightarrow |0\,0\,1\rangle \end{cases}$$



B/

نوسانگر سه بعدی همسانگرد

$$K_x = K_y = K_z \longrightarrow \text{در هر سه امتداد رفتار نوسانی مانند یکدیگر باشد}$$

$$\downarrow$$

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$$

$$\downarrow$$

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}Ky^2 + \frac{1}{2}Kz^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)$$

$$\longrightarrow \boxed{V(x,y,z) = V(\bar{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2}$$

در دستگاه کارتزین -

$$\alpha_x = \alpha_y = \alpha_z \equiv \alpha$$

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \sqrt[4]{\frac{\alpha^3}{\pi^3}}\frac{1}{\sqrt{2^{n_x+n_y+n_z}\,n_x!\,n_y!\,n_z!}}\,e^{-\frac{\alpha(x^2+y^2+z^2)}{2}}H_{n_x}(\sqrt{\alpha}x)H_{n_y}(\sqrt{\alpha}y)H_{n_z}(\sqrt{\alpha}z)$$

$$\epsilon_{n_x,n_y,n_z} = (n_x+\tfrac{1}{2})\hbar\omega + (n_y+\tfrac{1}{2})\hbar\omega + (n_z+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$= (n_x+n_y+n_z+\tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

لذا: $\epsilon_{n_x,n_y,n_z} = (\bar{n}+\frac{3}{2})\hbar\omega$

$$\bar{n} = n_x+n_y+n_z$$

★ نکته: حالت هایکه $\bar{n}$ یکسان دارند، تبهگن هستند

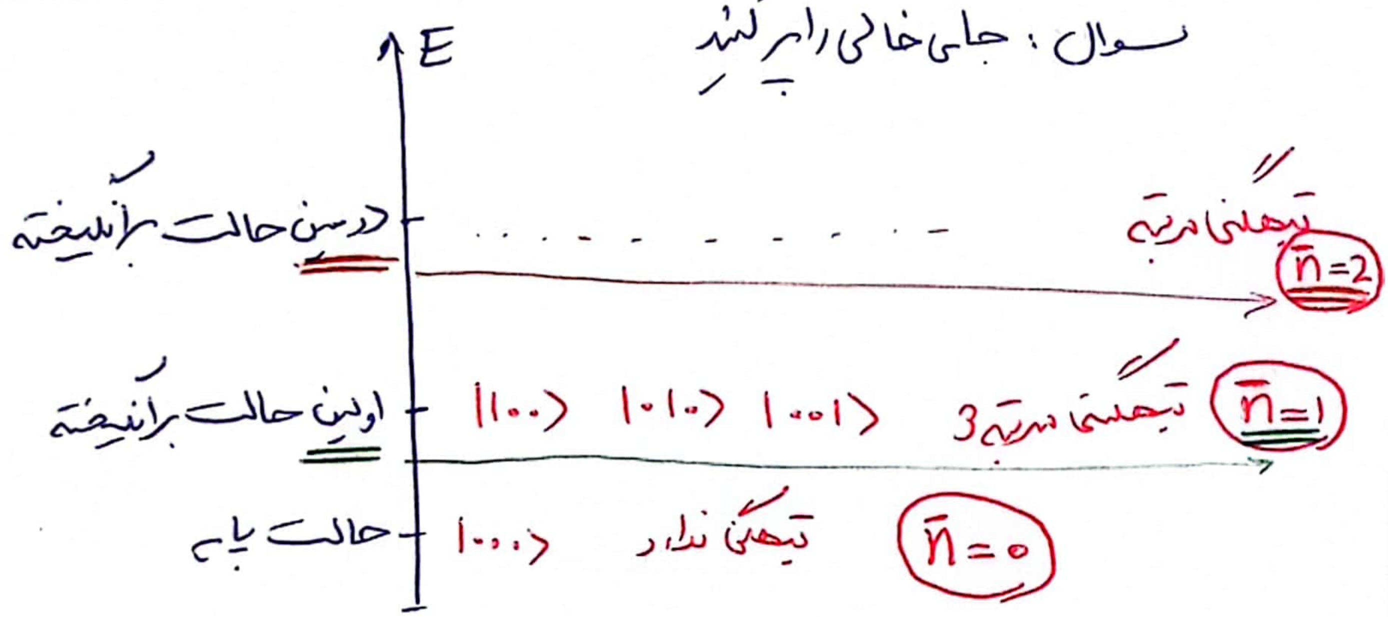
۴

حالت پایه ، $|000\rangle$ $\qquad \epsilon_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$

اولین حالت برانگیخته :

$$\left\{\begin{array}{ll} |100\rangle & \epsilon_{100} = \frac{5}{2}\hbar\omega \\ |010\rangle & \epsilon_{010} = \frac{5}{2}\hbar\omega \\ |001\rangle & \epsilon_{001} = \frac{5}{2}\hbar\omega \end{array}\right\} \text{تبهگنی مرتبه ۳}$$

سوال : جای خالی را پر کنید



---

* چون سامانه تقارن دارد، تبهگنی زیادی دارد.

* حالت با انرژی $(\bar{n}+\frac{3}{2})\hbar\omega$ دارای تبهگنی مرتبه $\frac{(\bar{n}+1)(\bar{n}+2)}{2}$ است. به عبارتی تراز $\bar{n}$ ام دارای تبهگنی فوق است

تمرین: نشان دهید مرتبه تبهگنی تراز $\bar{n}$ ام به صورت بالا است.

مثال / نمونه ای از ترکیب سطح های اولین حالت برانگیخته [redacted]

$\psi = \psi_{100}$ | $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{010} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{001}$ | $\psi = \frac{3i}{5}\psi_{100} - \frac{4}{5}\psi_{010}$

مثال/ کت حالت سامانه به صورت زیر را نرمالیزه کنید

$$\psi(x,y,z) = A\psi_{000} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{100}$$

حل

$$|\psi\rangle = A|000\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|100\rangle$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\left(A^*\langle 000| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 100|\right)\left(A|000\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|100\rangle\right) = 1$$

$$|A|^2 \underbrace{\langle 000|000\rangle}_{1} + \frac{A^*}{\sqrt{2}}\underbrace{\langle 000|100\rangle}_{0} + \frac{A}{\sqrt{2}}\underbrace{\langle 100|000\rangle}_{0} + \frac{1}{2}\underbrace{\langle 100|100\rangle}_{1} = 1$$

$$|A|^2 + \frac{1}{2} = 1 \longrightarrow |A|^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|000\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|100\rangle$$

مثال/ کت سامانه نوسانگر سه بعدی به صورت زیر است.

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|000\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|100\rangle$$

الف) تابع موج این حالت را بنویسید

$$\psi(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt[4]{\frac{\alpha^3}{\pi^3}}\, e^{-\alpha\frac{(x^2+y^2+z^2)}{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt[4]{\frac{\alpha^3}{\pi^3}}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-\alpha\frac{(x^2+y^2+z^2)}{2}}\underbrace{H_1(\sqrt{\alpha}\,x)}_{2\sqrt{\alpha}\,x}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt[4]{\frac{\alpha^3}{\pi^3}}\, e^{-\alpha\left(\frac{x^2+y^2+z^2}{2}\right)}\left(1 + \sqrt{2\alpha}\,x\right)$$

نکته:

* هر کدام از n_x ، n_y ، n_z که زوج باشند، تابع موج در آن راستا زوج و هرکدام که فرد باشند تابع موج در آن راستا فرد خواهد بود.

* تابع موج حالت پایه زوج است

$$\psi_{0,0,0}(x,y,z) = \psi_{000}(-x,-y,-z)$$

مثال/ برای یک حالت نوسانگر هماهنگ

$$|\psi\rangle = \frac{3}{5}|000\rangle + \frac{4i}{5}|001\rangle$$

الف) $\langle \hat{H} \rangle$ چقدر است؟

ب) احتمال اینکه در اندازه‌گیری انرژی عدد $\frac{5}{2}\hbar\omega$ بدست آید چقدر است؟

تمرین: آیا می‌توان گفت با وجود تبهگنی در نوسانگر هماهنگ سه بعدی، ویژه‌توابع آن متعامدند؟؟

مثلاً $\langle 100|010\rangle \overset{?}{=} 0$

نظر خود را اثبات کنید

مکانیک کوانتومی در دستگاه کروی

← گاهی با مسائلی سروکار داریم که تقارن کروی دارند

$$V(\bar{r}) = \frac{1}{2} K r^2$$ نوسانگر

$$V(\bar{r}) = -\frac{K}{r}$$ نیروی مرکزی

$$V(\bar{r}) = 0$$ ذره آزاد

$$V(\bar{r}) = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r > R \end{cases}$$ ذره در جعبه کروی

در حالت های چنانچه پتانسیل را بتوان در دستگاه کروی نوشت

$$V = V(r, \theta, \varphi)$$

می توان به دنبال حل معادله شرودینگر در دستگاه کروی رفت

هدف : { یافتن تابع موج برحسب r, θ, φ
و یافتن انرژی

$$\psi(r, \theta, \varphi) = ?$$

10

ساده‌ترین مسائل ← پتانسیل فقط وابستگی شعاعی داشته باشد

$$V = V(r)$$

* در این درس با پتانسیل‌هایی که وابستگی سمتی θ, ϕ دارند سروکار نخواهیم داشت

توجه: تابع موج وابستگی به r, θ, ϕ خواهد داشت

معادله شرودینگر

$$\hat{H}\psi(r,\theta,\phi) = \epsilon\,\psi(r,\theta,\phi)$$

* نکته: هر چند پتانسیل فقط تابع r است ← اما تابع موج به طور کلی تابع r, θ, ϕ است

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi = \epsilon\psi$$

لاپلاسین را در دستگاه کروی می‌نویسیم

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi$$

$$+V(r)\psi = \epsilon\psi$$

از آنجایی که $V = V(r)$ است ← می‌توان ψ شعاعی را با سمتی تفکیک کرد

$$\psi(r,\theta,\phi) = \underbrace{R(r)}_{}\,\underbrace{Y(\theta,\phi)}_{}$$

فقط تابعی از r (فاصله از مبدأ)

فقط تابعی از θ, ϕ

هدف یافتن $R(r)$, $Y(\theta,\phi)$ است.

جاگذاری در معادله قبلی ← خواهیم داشت

11

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{Y}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\right]-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{R}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{R}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2(YR) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\theta,\varphi}^2(YR)+V(r)RY-\epsilon RY=0$$

$$+V(r)RY-\epsilon RY=0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+[V(r)-\epsilon]r^2 \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y=0$$

$\div RY$, $\times r^2$

$\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1) \Rightarrow Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$-\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)$

تابعی از r

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\right]+[V(r)-\epsilon]r^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{Y\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{Y\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=0$$

تابعی از θ و φ

جمع دو عبارت که یکی تابع از r و دیگر تابع θ و φ است برابر صفر شده است

لذا تک تک آنها ثابت و مخالف یکدیگرند

به عبارتی:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\right]+[V(r)-\epsilon]r^2=\lambda \quad =-\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{Y\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{Y\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=-\lambda \quad =\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)$$

* می‌توان با λ ادامه داد و در نهایت دید که $-\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)$ می‌باشد که l عدد کوانتمی جم است.

۱۲

معادله شرودینگر شعاعی

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\right] + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]r^2 = \varepsilon r^2$$

$$\xrightarrow[\div r^2]{\times R} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\right]} + \left[V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}}\right]R = \varepsilon R$$

عدد کوانتومی مداری l در معادله شعاعی نقش می‌گیرد و تأثیرگذار است.

بستگی به ماهیت مسئله را

مستقل از اینکه مسئله چه چیزی باشد این ترم را داریم

پتانسیل مؤثر می‌دهد $\quad V_{eff} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$

ناشی از نیروی گریز از مرکز است

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m}$$

انرژی جنبشی شعاعی

ویژه مقدار — ویژه تابع ≡ تابع موج شعاعی

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = \epsilon R(r)$$

* بایستی فرمول $V(r)$ مسئله برای ما مشخص باشد که بتوانیم این معادله را ادامه دهیم

۱۳

معادله شرودینگر سمتی (زاویه‌ای)

$$\xrightarrow[\times 2mr^2]{\text{معادله سمتی صفحه ۱۱}} \quad -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y(\theta,\phi)=\hbar^2 l(l+1)Y(\theta,\phi)$$

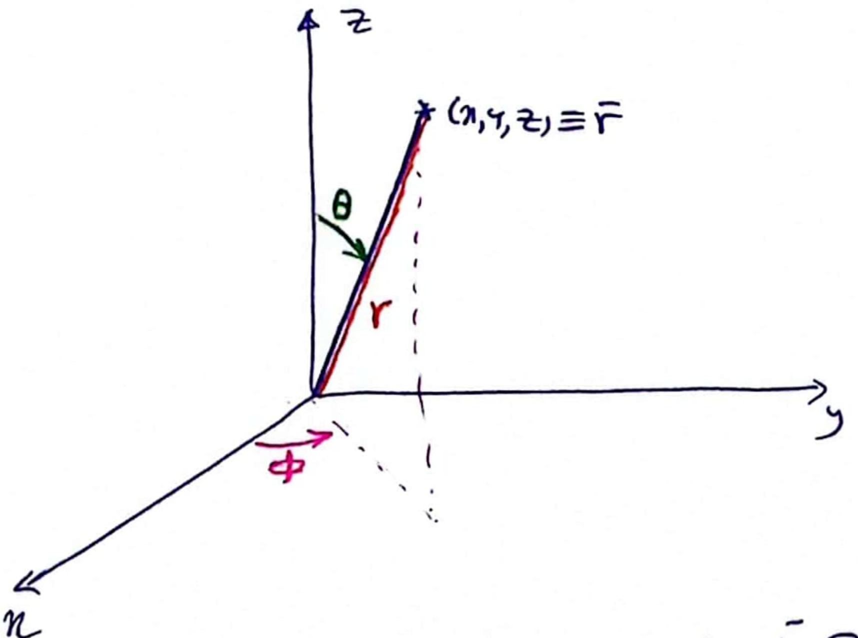
ویژه تابع $\equiv$ تابع موج سمتی

ویژه مقدار

* چون پتانسیل وابستگی θ و ϕ ندارد می‌توان اینجا معادله را ادامه داد

* می‌توان بخش θ و ϕ را از هم تفکیک کرد در تابع موج سمتی

$$Y(\theta,\phi)=\underbrace{\Theta(\theta)}_{\text{تابع }\theta}\underbrace{\Phi(\phi)}_{\text{تابع}}$$



$\Theta(\theta)$ تابعی از θ و $\Phi(\phi)$ تابعی از ϕ است

جایگذاری

$$-\hbar^2\left[\frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right]=\hbar^2 l(l+1)\Theta\Phi$$

$$\xrightarrow[\times \sin^2\theta]{\div \Theta\Phi}$$ صفحه بعد

۱۴/

$$-\hbar^2\left[\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right]=\hbar^2 l(l+1)\sin^2\theta$$

بازنویسی مجدد :

$$\underbrace{-\hbar^2\left[\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right]-\hbar^2 l(l+1)\sin^2\theta}_{\theta\ \text{تابعی از}}\ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}}_{\phi\ \text{تابعی از}}=0$$

* عبارت (معادله) فوق برای هر ϕ و θ برقرار است
* آنها برابر ثابت و مخالف یکدیگرند

$-m_l^2\hbar^2$ $\qquad$ $m_l^2\hbar^2$

← اینکه چرا این اعداد ثابت را اینگونه گرفته‌ایم، مهندسی معکوس است

← m_l عدد کوانتومی است.

$$\begin{cases} -\hbar^2\dfrac{\sin\theta}{\Theta}\dfrac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\dfrac{d\Theta}{d\theta}\right)-\hbar^2 l(l+1)\sin^2\theta=-m_l^2\hbar^2 \\ \\ -\dfrac{\hbar^2}{\Phi}\dfrac{d^2\Phi}{d\phi^2}=m_l^2\hbar^2 \end{cases}$$

← هدف یافتن $\Theta(\theta)$ ، $\Phi(\phi)$ است

* در پتانسیل‌های شعاعی $V=V(r)$ حل تحت Θ ، Φ ربطی به پتانسیل ندارد

حل بخش زاویه‌ای تابع موج

$\Phi(\phi) = ?$ ←

$\Theta(\theta) = ?$ ←

تابع Φ

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = m_l^2\hbar^2}_{} \Rightarrow \underbrace{\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0}_{}$$

حل آن را به بعد موکول می‌کنیم ← معادله حاکم بر Φ

* معادله حاکم بر Φ ربطی به $V(r)$ ندارد

بازنویسی

$$\underbrace{\left(-\hbar^2\frac{d^2}{d\phi^2}\right)}_{\text{عملگر}}\ \underbrace{\Phi}_{\text{ویژه تابع}} = \overbrace{(m_l^2\hbar^2)}^{\text{ویژه مقدار}}\ \Phi$$

عملگر ← $(\hat{L}_z)$

* بعداً در مورد اپراتور عملگر جهت بحث می‌کنیم ← به جای حل معادله شرودینگر برای Φ به دنبال ویژه مقدار (ویژه تابع) عملگر فوق می‌توان رفت

تابع Θ

$$-\frac{\hbar^2\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \hbar^2 l(l+1)\sin^2\theta + m_l^2\hbar^2 = 0$$

$$\xrightarrow{\div(-\sin^2\theta)} \underbrace{\hbar^2\frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{m_l^2\hbar^2}{\sin^2\theta} = -\hbar^2 l(l+1)}_{}$$

حل را به بعد موکول می‌کنیم ← معادله حاکم Θ

* معادله حاکم بر Θ نیز ربطی به $V(r)$ ندارد

۲

ویژه مقدار

$$\underbrace{-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\left(\frac{d}{d\theta}\right)-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right]}_{\text{عملگر}}\Theta = \underbrace{\hbar^2\ell(\ell+1)}\Theta$$

$\hat{L}^2$

ویژه تابع

* بعداً بیشتر از این عملگر صحبت خواهیم کرد ← به جای حل معادله شرودینگر زاویه‌ای Θ میتوان به دنبال ویژه توابع این عملگر رفت

جمع بندی تا کنون

← چنانچه پتانسیل فقط به اندازه r بستگی داشته باشد $V=V(r)$

از حل شعاعی معادله شرودینگر $R(r)$ حاصل میشود

* خواهیم دید که بخش شعاعی دو اندیس کوانتومی دارد

$$R_{n,\ell}(r)$$

← بخش زاویه‌ای نیز $\Theta(\theta)$ و $\Phi(\phi)$ را می‌دهد

$$\Theta_{\ell,m_\ell}(\theta)\ ,\ \Phi_{m_\ell}(\phi)$$

لذا شکل کلی معادله شرودینگر حل شده در دستگاه کروی، تابع موج به صورت کلی زیر را خواهد داشت:

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\phi)=R_{n,\ell}(r)\,\Theta_{\ell,m_\ell}(\theta)\,\Phi_{m_\ell}(\phi)\equiv\langle \vec{r}\,|\,n,\ell,m_\ell\rangle$$

۳

$$\boxed{\hat{H}\psi_{n,l,m_l} = \epsilon_{n,l,m_l}\psi_{n,l,m_l}}$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{H}|n,l,m_l\rangle = \varepsilon_{n,l,m_l}|n,l,m_l\rangle$$

حل بخش زاویه‌ای معادله شرودینگر

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_l^2\Phi \longrightarrow \Phi(\phi) = e^{+im_l\phi}$$

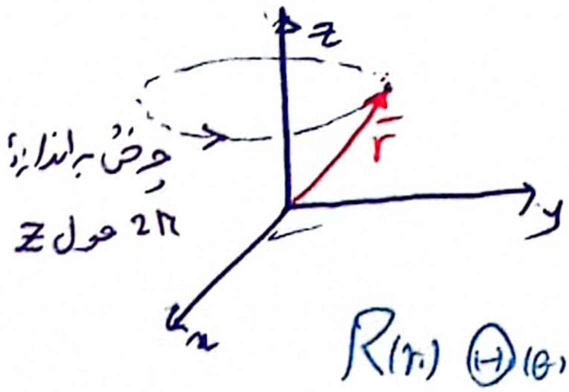
$$(im_l)^2 e^{im_l\phi} = -m_l^2 e^{im_l\phi}$$

m_l نمی‌دانیم چیست (قبلاً همینطوری وارد معادلات کردیم)

* Φ به مقدار m_l وابسته است $\Longleftarrow$

$\Phi_{m_l}(\phi)$

سوال: m_l چه مقادیری می‌تواند داشته باشد؟ جواب: قاعدتاً تابع موج با دوران دستگاه به اندازهٔ 2π نباید تغییر کند.



$$\phi \to \phi + 2\pi \Rightarrow \psi(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi+2\pi)$$

$$R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\phi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\phi+2\pi)$$

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi+2\pi)$$

Φ بدست آمده از حل

معادله شرودینگر باید این قید را داشته باشد

۴) $\Phi_{m_l}(\phi) = \Phi_{m_l}(\phi + 2\pi) \rightarrow e^{im_l\phi} = e^{im_l(\phi+2\pi)}$

$$e^{im_l 2\pi} = 1 \Longrightarrow \boxed{m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots}$$

لذا مقادیر مجاز برای عدد کوانتومی m_l گسسته و صحیح هستند

سوال: عملگری که $\Phi_{m_l}(\phi)$ ویژه تابع آن است چه عملگری است؟

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2} \rightarrow ?$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\phi}$$

در تمرین اول حل کردیم

$$\Downarrow$$

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2}$$

$$\hat{L}_z \Phi(\phi) = -i\hbar \frac{d}{d\phi} e^{im_l\phi} = -i\hbar (im_l) e^{im_l\phi}$$

$$\hat{L}_z \Phi = m_l \hbar \Phi$$

همان رابطه ویژه مقداری - ویژه برداری بود که قبلا داشتیم

* لذا $\hat{L}_z$ (مؤلفه z تکانه زاویه‌ای مداری) برای ذره‌ای که پتانسیل آن فقط وابستگی شعاعی $V(r)$ دارد گسسته است.

از آنجا که مقادیر مجاز برای عدد کوانتومی سمتی m_l به صورت زیر است:

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$$

لذا مقادیر مؤلفه z تکانه زاویه مداری عبارتند از:

$$L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar, \dots$$

* جهت $\vec{L}$ هر جهتی نمی‌باشد
* جهت $\vec{L}$ کوانتیده است به صورتی که مؤلفه ~~[illegible]~~ z آن یکی از مقادیر فوق را داشته باشد.
* نشان خواهیم داد که اندازه L نیز کوانتیده است

این نکات فقط در کوانتوم است

* کوانتش تکانه زاویه‌ای مداری ← جهت ، ← اندازه

سوال: عملگری که $\Theta_{l,m_l}(\theta)$ ویژه تابع آن باشد، چیست؟

جواب: $\hat{L}^2$ به عنوان تمرین نشان دهید که

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right] = \hat{L}^2$$

مجذور اندازه (به توان 2) تکانه زاویه‌ای مداری

۴

$$\hat{L}^2\, \Theta_{l,m_l}(\theta) = \hbar^2 l(l+1)\, \Theta_{l,m_l}(\theta)$$

عملگر ← $\hat{L}^2$ ، ویژه تابع ← $\Theta_{l,m_l}(\theta)$ ، ویژه مقدار ← $\hbar^2 l(l+1)$

بعداً نشان می دهیم که l نیز کوانتیده است

$l = 0, 1, 2, \dots \longrightarrow l \geq 0$

عدد کوانتومی مداری

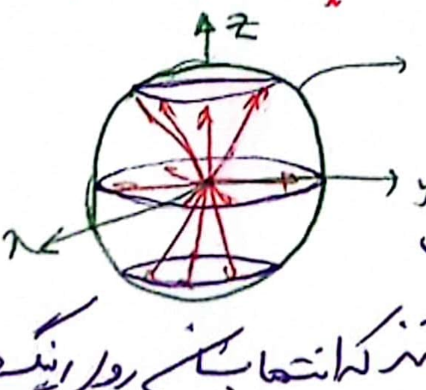
لذا مقادیری که اندازه بردار تکانه زاویه‌ای مداری جسمی که در پتانسیل $V(r)$ قرار دارد می تواند یکی از مقادیر زیر باشد ← $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$

$$|\mathbf{L}| = 0, \sqrt{2}\,\hbar, \sqrt{6}\,\hbar, \dots$$

نکته مهم: بعداً نشان خواهیم داد که عدد کوانتومی مداری (l) و عدد کوانتومی سمتی (m_l) بی ارتباط با هم نیستند

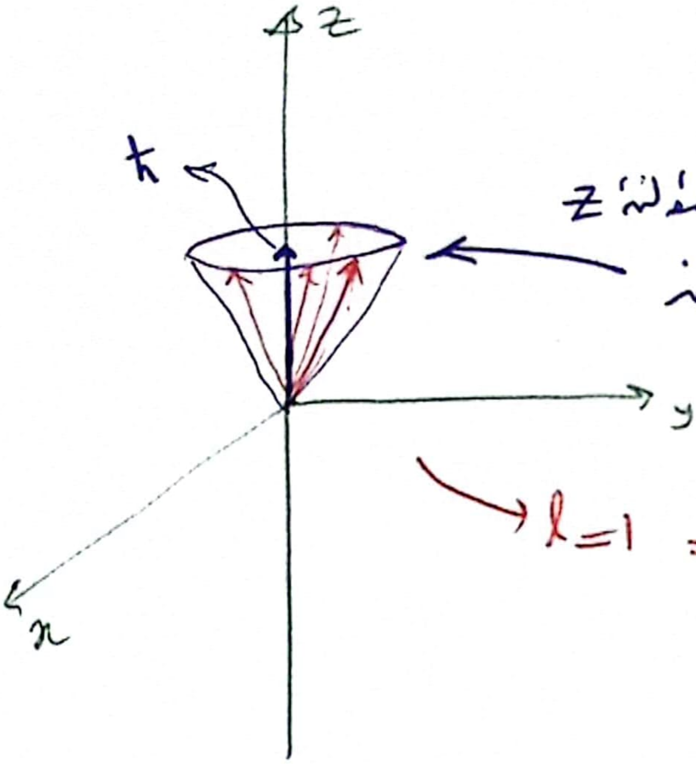
اول l مشخص می شود ← $-l \leq m_l \leq l$

مثال/ $l=1 \longrightarrow m_l = -1, 0, 1$



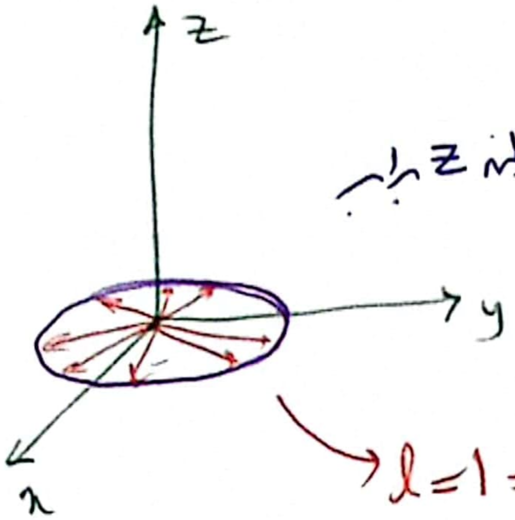
* کره ای به شعاع $\sqrt{1(1+1)}\,\hbar \equiv \sqrt{2}\,\hbar$
* هر برداری که مبدأ آن در مرکز و انتهای آن روی سطح کره باشد طولش $\sqrt{2}\,\hbar$ است.
* از دید کوانتومی L مجاز آنهایی هستند که انتهایشان روی رینگ‌های بنفش داخل کره باشد

V



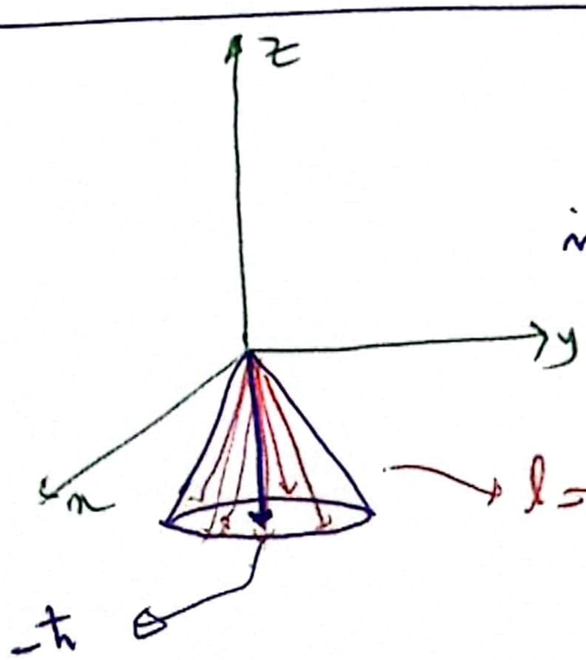
بردارهای روی این مخروط مؤلفه z برابر باهم و برابر با ħ دارند

$$l=1 \Rightarrow |L|=\sqrt{2}\hbar \quad , \quad L_z=\hbar$$



بردارهای روی این دیسک مؤلفه z برابر باهم (صفر) دارند

$$l=1 \Rightarrow |L|=\sqrt{2}\hbar \quad , \quad L_z=0$$



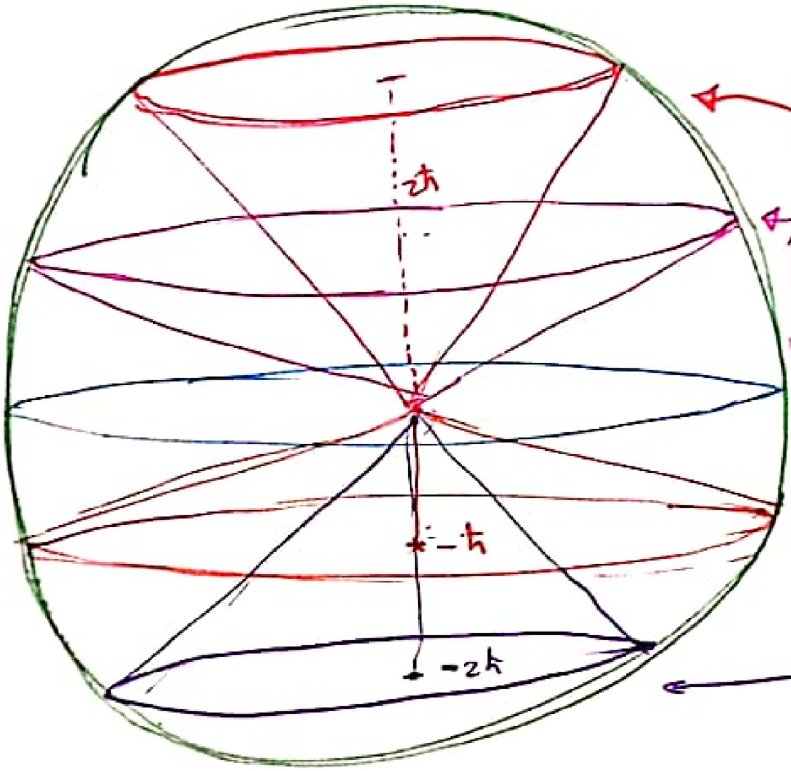
بردارهای روی این مخروط مؤلفه z برابر باهم $(-\hbar)$ دارند

$$l=1 \Rightarrow |L|=\sqrt{2}\hbar \quad , \quad L_z=-\hbar$$

مثال ۱ بردارهای مجاز برای $\vec{L}$ را به ازای عدد کوانتومی $l=2$ رسم کنید

$$l=2 \longrightarrow |L| = \sqrt{2(2+1)}\,\hbar = \sqrt{6}\,\hbar$$

کره‌ای به شعاع $\sqrt{6}\,\hbar$ تصور کنیم



$l=2 \Rightarrow m_l = -2,-1,0,1,2$

$L_z = +2\hbar$

$L_z = \hbar$

$L_z = 0$

$L_z = -\hbar$

$L_z = -2\hbar$

مقادیر مجاز برای L_z

سوال: چنانچه تکانه زاویه‌ای صفر باشد؟

$$L=0 \longrightarrow l=0 \longrightarrow m_l=0 \longrightarrow L_z=0$$

مؤلفه‌ی z هم صفر است.

نکته: پیشاپیش بپذیریم که

$\ell = 0 \longrightarrow$ اربیتال s

$\ell = 1 \longrightarrow$ اربیتال p

$\ell = 2 \longrightarrow$ اربیتال d

جمع بندی:

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\varphi) = R_{n,\ell}(r)\, \Theta_{\ell,m_\ell}(\theta)\, \Phi_{m_\ell}(\varphi)$$

تا اینجا فقط Φ را حساب کردیم. بقیه هنوز مانده

$$\hat{H}\,\psi_{n,\ell,m_\ell} = \varepsilon_{n,\ell,m_\ell}\,\psi_{n,\ell,m_\ell}$$

نوتاسیون دیراک

$$\hat{H}\,|n,\ell,m_\ell\rangle = \varepsilon_{n,\ell,m_\ell}\,|n,\ell,m_\ell\rangle$$

$$\hat{L}_z\,\psi_{n,\ell,m_\ell} = \hat{L}_z\left(R_{n,\ell}\,\Theta_{\ell,m_\ell}\,\Phi_{m_\ell}\right) = R_{n,\ell}\,\Theta_{\ell,m_\ell}\,\hat{L}_z\Phi_{m_\ell} = m_\ell\hbar\, R_{n,\ell}\,\Theta_{\ell,m_\ell}\,\Phi_{m_\ell}$$

$$\hat{L}_z\,\psi_{n,\ell,m_\ell} = m_\ell\hbar\,\psi_{n,\ell,m_\ell}$$

نوتاسیون دیراک

$$\underbrace{\hat{L}_z\,|n,\ell,m_\ell\rangle = m_\ell\hbar\,|n,\ell,m_\ell\rangle}_{\text{نکته دارد}}$$

نکته ۱: هدف ما یافتن ویژه بردار (تابع) ها مشترک است

نشان داده می‌شود که $|n,l,m_l\rangle$ ویژه بردار همزمان $\hat{H}$ ، $\hat{L}_z$ است

$$\longrightarrow [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

چنانچه ویژه بردارها ها مشترک تبهگنی داشته باشند، $\hat{L}_z$ را می‌توان برای تفکیک قائل شدن این ویژه بردارها بکار برد.

$$\hat{L}^2 \psi_{n,l,m_l} = \hat{L}^2 R_{n,l} \Theta_{l,m_l} \Phi_{m_l} = R_{n,l} \Phi_{m_l} \hat{L}^2 \Theta_{l,m_l} = \hbar^2 l(l+1) R_{n,l} \Phi_{m_l} \Theta_{l,m_l}$$

$$\hat{L}^2 \psi_{n,l,m_l} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{n,l,m_l}$$

$$\Big\downarrow \text{نوتاسیون دیراک}$$

$$\underbrace{\hat{L}^2 |n,l,m_l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n,l,m_l\rangle}_{\text{دلالت دارد}}$$

* $|n,l,m_l\rangle$ ها ویژه بردارهای $\hat{L}^2$ نیز هستند

$$\longrightarrow [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

مثال / کت هایی که تکانه زاویه‌ای مداری آنها $\sqrt{2}\hbar$ است بنویسید

11

$$|L| = \sqrt{2}\hbar \longrightarrow l=1 \Longrightarrow m_l = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

$$|n,1,1\rangle \quad , \quad |n,1,0\rangle \quad , \quad |n,1,-1\rangle$$

حالا اثر عملگر $\hat{L}^2$ را روی این کت ها حساب کنید

$$\hat{L}^2 |n,\underset{l}{1},\underset{m_l}{1}\rangle = \hbar^2\, 1(1+1)|n,1,1\rangle = 2\hbar^2 |n,1,1\rangle$$

$$\hat{L}^2 |n,1,0\rangle = \hbar^2\, 1(1+1)|n,1,0\rangle = 2\hbar^2 |n,1,0\rangle$$

$$\hat{L}^2 |n,1,-1\rangle = \hbar^2\, 1(1+1)|n,1,-1\rangle = 2\hbar^2 |n,1,-1\rangle$$

نکته: $l=1$ ← تبهگنی مرتبه 3 در اندازه تکانه زاویه‌ای مداری دارد

هر سه کت بالا یک ویژه مقدار دارند

رفع تبهگنی: اثر عملگر $\hat{L}_z$ را روی کت های فوق حساب کنید

$$\hat{L}_z |n,\underset{l}{1},\underset{m_l}{1}\rangle = 1\hbar |n,1,1\rangle = \hbar |n,1,1\rangle$$

← در محور z بالا

$$\hat{L}_z |n,1,0\rangle = 0\hbar |n,1,0\rangle = 0 \longrightarrow$$ در راستای وسط

$$\hat{L}_z |n,1,-1\rangle = -1\hbar |n,1,-1\rangle = -\hbar |n,1,-1\rangle$$

← در محور z پایین

هر سه از نظر اندازه تکانه یکسان اما از نظر جهت متفاوت اند

فعلاً n را نمی‌دانیم چیست، ولی

$$\ell = 0 \longrightarrow |n,0,0\rangle$$

$\longleftarrow$ $\hat{L}^2$ تبهگنی ندارد

$$\ell = 1 \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} |n,1,1\rangle \\ |n,1,0\rangle \\ |n,1,-1\rangle \end{array} \right.$$

$\longleftarrow$ $\hat{L}^2$ تبهگنی مرتبه 3 دارد

$$\ell = 2 \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} |n,2,2\rangle \\ |n,2,1\rangle \\ |n,2,0\rangle \\ |n,2,-1\rangle \\ |n,2,-2\rangle \end{array} \right.$$

$\longleftarrow$ $\hat{L}^2$ تبهگنی مرتبه 5 دارد

$$\ell = 3 \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} |n,3,3\rangle \\ |n,3,2\rangle \\ |n,3,1\rangle \\ |n,3,0\rangle \\ |n,3,-1\rangle \\ |n,3,-2\rangle \\ |n,3,-3\rangle \end{array} \right.$$

$\longleftarrow$ $\hat{L}^2$ تبهگنی مرتبه 7 دارد

$$\ell \longrightarrow$$ $\hat{L}^2$ تبهگنی مرتبه ...... دارد

1

محاسبه $\Theta(\theta)$

$$\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[-m_l^2+l(l+1)\sin^2\theta\right]\Theta=0$$

θ زاویه سمتی در مختصات کروی است $\leftarrow$ $0\leqslant\theta\leqslant\pi$

برای حل معادله فوق تغییر متغیر می دهیم.

$u=\cos\theta \Rightarrow -1\leqslant u\leqslant 1$

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{du}{d\theta}\frac{d}{du}=-\sin\theta\frac{d}{du}$$

$$\xrightarrow{\times\sin\theta}\sin\theta\frac{d}{d\theta}=-\sin^2\theta\frac{d}{du}=-[1-\cos^2\theta]\frac{d}{du}=-[1-u^2]\frac{d}{du}$$

$\Theta(\theta)$ اندیس کوانتومی دارد

$$[1-u^2]\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{d\Theta_{l,m_l}}{du}\right]+\left[-m_l^2+l(l+1)(1-u^2)\right]\Theta_{l,m_l}=0$$

$$\xrightarrow{\div(1-u^2)}\boxed{\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{d\Theta_{l,m_l}}{du}\right]+\left[-\frac{m_l^2}{1-u^2}+l(l+1)\right]\Theta_{l,m_l}=0}$$

معادله لژاندر وابسته

$$\text{if } m_l=0\Rightarrow\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{d\Theta_{l,0}}{du}\right]+\left[0+l(l+1)\right]\Theta_{l,0}=0$$

$$\boxed{\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{dP_l(u)}{du}\right]+l(l+1)P_l(u)=0}$$

معادله لژاندر $\leftarrow$ برای هر l، از حل این معادله $\{P_l(u)$

حال $\leftarrow$ جا شود $\Leftarrow$ با داشتن $P_l(u)$ ها می‌توان Θ_{l,m_l} را حساب کرد

2

$P_l(u)$ را نمی‌دانیم جهت ادامه آن را به صورت بسط چند جمله‌ای می‌نویسیم تا در نهایت ضرایب بسط و لذا $P_l(u)$ را پیدا کنیم.

$$P_l(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3 + \cdots + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n$$

$$\frac{dP_l(u)}{du} = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n u^{n-1}$$

جایگذاری در معادله لژاندر:

$$\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\sum_{n=0}^{\infty} n a_n u^{n-1}\right] + l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n = 0$$

$$\frac{d}{du}\sum_{n=0}^{\infty}\left[n a_n u^{n-1} - n a_n u^{n+1}\right] + \sum_{n=0}^{\infty} l(l+1) a_n u^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n-1) a_n u^{n-2} - n(n+1) a_n u^n\right] + \sum_{n=0}^{\infty} l(l+1) a_n u^n = 0$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n u^{n-2} - \sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n+1) - l(l+1)\right] a_n u^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} u^n - \sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n+1) - l(l+1)\right] a_n u^n = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\left[(n+2)(n+1) a_{n+2} - [n(n+1) - l(l+1)] a_n\right]}_{=0} u^n = 0$$

ضریب u^n صفر است

3

$$(n+2)(n+1)\,a_{n+2} - [n(n+1) - l(l+1)]\,a_n = 0$$

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - l(l+1)}{(n+2)(n+1)}\,a_n$$

اگر a_0 را داشته باشیم $\Longrightarrow$

$$\begin{cases} a_2 = \dfrac{-l(l+1)}{2}\,a_0 & \Leftarrow n=0 \\ a_4 = \dfrac{6 - l(l+1)}{12}\,a_2 = \bigcirc\, a_0 & \Leftarrow n=2 \\ \vdots \end{cases}$$

لذا با داشتن a_0، ضرایب زوج در بسط $P_l(u)$ قابل محاسبه خواهد بود

اگر a_1 را داشته باشیم $\Longrightarrow$

$$\begin{cases} a_3 = \dfrac{3 - l(l+1)}{6}\,a_1 & \Leftarrow n=1 \\ a_5 = \dfrac{12 - l(l+1)}{20}\,a_3 = \bigcirc\, a_1 & \Leftarrow n=3 \\ \vdots \end{cases}$$

* لذا با داشتن a_1، ضرایب فرد در بسط $P_l(u)$ محاسبه خواهد شد

سری $P_l(u)$ باید همگرا باشد. از آنجا که $-1 \leq u \leq 1$

$$P_l(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n$$

$\longrightarrow$ if $-1 < u < 1 \Rightarrow 0 < \theta < \pi \longrightarrow$

$\Longleftarrow$ مطابقت سری $P_l(u)$ همواره همگرا است

چون u^n همواره کوچکتر می‌شود با افزایش n

if $u = \pm 1 \rightarrow \theta = 0, \pi$

$P_l(u)$ واگرا می‌شود $\Longleftarrow$ غیرقابل قبول $\longrightarrow$ دیگر $\longrightarrow$ محدود خواهد بود اگر سری تا بی‌نهایت ادامه نداشته باشد

چون

$P_l(+1) = a_0 + a_1 1^1 + a_2 1^2 + a_3 1^3 + \dots$ ← به بی‌نهایت میل می‌کند

$P_l(-1) = a_0 + a_1(-1)^1 + a_2(-1)^2 + a_3(-1)^3 + \dots$ ← به بی‌نهایت میل می‌کند

4

محدود کردن جملات چند جمله‌ای لژاندر:

① یا a_0 باید صفر باشد یا a_1 باید صفر باشد

جملات فرد باقی می‌مانند ← باید سری جملات فرد از یک جا به بعد قطع شود

جملات زوج باقی می‌مانند ← باید سری جملات زوج از یک جا به بعد قطع شود

مثال/ فرض از a_3 به بعد صفر شوند

$$a_0 = 0 \quad , \quad a_3 = 0$$

$$a_3 = 0 \longrightarrow a_5 = a_7 = a_9 = \dots = 0$$

$$a_0 = 0 \longrightarrow a_2 = a_4 = a_8 = \dots = 0$$

$$P_l(u) = \cancel{a_0} + a_1 u + \cancel{a_2 u^2} + \cancel{a_3 u^3} + \cancel{a_4 u^4} + \cancel{a_5 u^5} + \dots$$

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - l(l+1)}{(n+1)(n+2)} a_n$$

لذا

$$P_l(u) = a_1 u$$

سوال: در چه صورت a_3 صفر می‌شود؟

$$a_3 = \frac{2 - l(l+1)}{(2)(3)} a_1 = 0 \implies \begin{cases} a_1 \neq 0 \\ \text{لذا} \\ 2 - l(l+1) = 0 \implies l = 1 \end{cases}$$

$$P_1(u) = a_1 u$$

5

جمع‌بندی ←
* اگر l زوج باشد ← سری P_l زوج است
* اگر l فرد باشد ← سری P_l فرد است
* بیشترین توان ظاهر شده در P_l از مرتبه (توان) l است

$$l=0 \longrightarrow P_0(u) = a_0 + a_1 u + 0 + a_3 u^3 + 0 + a_5 u^5 + 0 + \cdots$$

$$\longrightarrow a_2 = 0 \Rightarrow a_4 = a_6 = \cdots = 0$$

$$\text{if } a_1 = 0 \longrightarrow P_0(u) = a_0$$

$$\text{if } a_0 = 1 \longrightarrow \boxed{P_0(u) = 1}$$

$$l=1 \longrightarrow a_3 = 0 \Rightarrow a_5 = a_7 = a_9 = \cdots = 0$$

$$P_1(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + 0 + a_4 u^4 + 0 + a_6 u^6 + \cdots$$

$$\text{if } a_0 = 0 \longrightarrow P_1(u) = a_1 u$$

$$\text{if } a_1 = 1 \longrightarrow \boxed{P_1(u) = u}$$

$$l=2 \longrightarrow a_4 = 0 \Rightarrow a_6 = a_8 = a_{10} = \cdots = 0$$

$$P_2(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3 + 0 + a_5 u^5 + 0 + a_7 u^7 + \cdots$$

$$\text{if } a_1 = 0 \longrightarrow P_2(u) = a_0 + a_2 u^2$$

$$P_2(u) = a_0 + \frac{0(0+1) - 2(2+1)}{(1)(2)} a_0 u^2$$

$$\text{if } a_0 = \frac{-1}{2} \longrightarrow P_2(u) = -\frac{1}{2}(1 - 3u^2)$$

$$\boxed{P_2(u) = \frac{1}{2}(3u^2 - 1)}$$

$\ell=3 \longrightarrow a_5=0 \Rightarrow a_7=a_9=a_{11}=\cdots=0$

$$P_3(u) = a_0 + a_1u + a_2u^2 + a_3u^3 + a_4u^4 + 0 + a_6u^6 + 0 + \cdots$$

if $a_0=0 \Rightarrow P_3(u) = a_1u + a_3u^3 + \cdots$

$$P_3(u) = a_1u + \frac{2-(3)(4)}{(2)(3)}a_1u^3$$

$$P_3(u) = a_1\left(u - \frac{5}{3}u^3\right)$$

if $a_1 = -\frac{3}{2} \longrightarrow P_3(u) = \frac{1}{2}(5u^3 - 3u)$

تمرین ← $P_4(u)$ و $P_5(u)$ را حساب کنید

تمرین: $P_0(\cos\theta)$ ، $P_1(\cos\theta)$ ، $P_2(\cos\theta)$ و $P_3(\cos\theta)$ را بنویسید

نکته: ضریب a_0 را برای P_ℓ های زوج به گونه‌ای انتخاب می‌کنند که $P_\ell(+1)=1$ شود

نکته: ضریب a_1 را برای P_ℓ های فرد به گونه‌ای انتخاب می‌کنند که $P_\ell(+1)=1$ شود

* $P_\ell(u)$ یک چند جمله‌ای از مرتبه ℓ است

* توابع لژاندر بر هم عمودند

if $\ell \neq \ell' \Rightarrow P_\ell(u) \perp P_{\ell'}(u)$

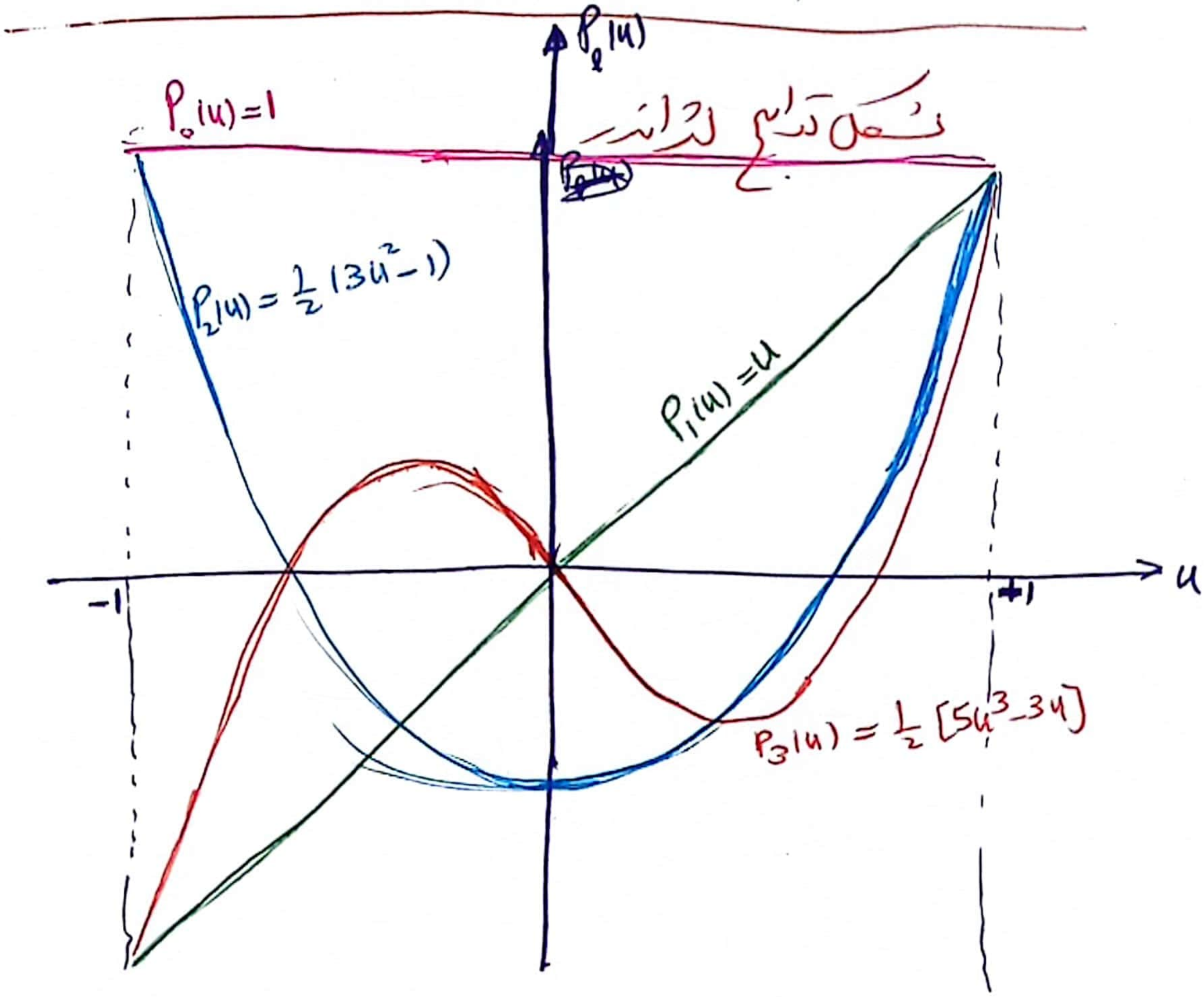
بسیار مهم $\displaystyle\int_{-1}^{+1} P_\ell(u)\, P_{\ell'}(u)\, du = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'}$

روش سریع تر برای محاسبه چند جمله‌ای های لژاندر

فرمول رودریگز

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l\, l!}\,\frac{d^l}{du^l}(u^2-1)^l$$

تمرین: P_0 ، P_1 ، P_2 و P_3 را با استفاده از فرمول رودریگز حساب کنید



8

$$(l+1)P_{l+1}(u) - (2l+1)uP_l(u) + lP_{l-1}(u) = 0$$

$$(u^2-1)P'_l(u) = luP_l(u) + lP_{l-1}(u)$$

روابط بازگشتی توابع لژاندر

⟵ بیشتر در انتگرال هایی که مقدار چند جمله‌ای وارد حاصل شود است، کاربرد دارد.

بازگشت به متغیر θ

$$u = \cos\theta \longrightarrow P_0(\cos\theta) = 1$$

$$P_1(\cos\theta) = \cos\theta$$

$$P_2(\cos\theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$$

$\vdots$

$du = -\sin\theta\, d\theta$

تعامد

$$\int_0^\pi P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = \frac{2}{l(l+1)}\delta_{ll'}$$

معادله لژاندر وابسته $m_l \neq 0$

$$\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{d\Theta_{l,m_l}}{du}\right] + \left[\frac{-m_l^2}{1-u^2} + l(l+1)\right]\Theta_{l,m_l} = 0$$

سوال $\Theta_{l,m_l} = ?$ ⟸ اگر مرجع

تابع لژاندر وابسته ⟵ $P_{l,m_l}(u) \equiv \Theta_{l,m_l}$

$$\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{dP_{l,m_l}}{du}\right] + \left[\frac{-m_l^2}{1-u^2} + l(l+1)\right]P_{l,m_l} = 0$$

9

برای سادگی از حل معادله لژاندر وابسته صرف نظر می‌کنیم و توابع لژاندر وابسته را از روی تبدیل شده آن حساب می‌کنیم

$$m \neq 0 \Longrightarrow P_{l,m_l}(u) = (1-u^2)^{\frac{|m_l|}{2}} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u)$$

نکته بسیار مهم

$$\text{if } |m_l| > l \longrightarrow P_{l,m_l}(u) = 0$$

تمرین: دلیل نکته فوق را عنوان کنید

قبلاً بدون اثبات این نکته را بیان کردیم، آن را کجا دیدیم ← یادآوری

$$\text{به ازای } l \longrightarrow m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

مقادیر مجاز برای m_l ← $|m_l| < l$

مثال/ محاسبه برخی توابع لژاندر وابسته

$P_{00}(u) = ?$

$P_{1,1}(u) = ?$

$P_{1,0}(u) = ?$

$P_{1,-1}(u) = ?$

نکته: $P_{l,m_l}(u) = P_{l,-m_l}(u)$

تمرین

تعامد:

$$\int_{-1}^{1} P_{l,m_l}(u)\, P_{l',m_l}(u)\, du = \frac{2}{2l+1}\, \frac{(l+|m_l|)!}{(l-|m_l|)!}\, \delta_{ll'}$$

1

پاسخ بخش زاویه ای معادله شرودینگر

$$\psi(r,\theta,\phi)=R_n(r)\,\underbrace{\Theta_{l,m_l}(\theta)\,\Phi_{m_l}(\phi)}$$

$$Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

این توابع تشکیل پایه کامل می دهند

شکل ها آن:

منفی است

$m_l>0$

$$Y_{l,m_l}(\theta,\phi)=(-1)^{|m_l|}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}}\;P_{l,m_l}(\cos\theta)\,e^{im\phi}$$

که برای بهنجارش افزوده شد.

* Y_{l,m_l} ها توابع مختلط هستند

* Y_{l,m_l} ها از رابطه تعامد تبعیت می کنند

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}Y^*_{lm_l}(\theta,\phi)\,Y_{l'm'_l}(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi=\delta_{ll'}\,\delta_{m_lm'_l}$$

$$\cancel{Y^*_{l,m_l}(\theta,\phi)=(-1)^{m_l}Y_{l,-m_l}(\theta,\phi)}\;\to\;Y_{l,-m_l}=(-1)^{m_l}Y^*_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

جمع بندی از جلسات قبل:

$$\hat{L}^2|l,m_l\rangle=\hbar^2\,l(l+1)\,|l,m_l\rangle$$

$$\hat{L}_z|l,m_l\rangle=m_l\hbar\,|l,m_l\rangle$$

۲ مثال ۱

$$\ell = 2 \longrightarrow m_\ell = \begin{cases} 2 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{cases}$$

حالات مجاز: $|2,2\rangle \,,\, |2,1\rangle \,,\, |2,0\rangle \,,\, |2,-1\rangle \,,\, |2,-2\rangle$

$$\hat{L}^2 |2,m\rangle = \hbar^2\, 2(2+1)\, |2,m\rangle = 6\hbar^2 |2,m\rangle$$

$$\hat{L}_z |2,m\rangle = m\hbar\, |2,m\rangle \Longrightarrow \begin{cases} \hat{L}_z |2,2\rangle = 2\hbar\, |2,2\rangle \\ \hat{L}_z |2,1\rangle = \hbar\, |2,1\rangle \\ \hat{L}_z |2,0\rangle = 0 \\ \hat{L}_z |2,-1\rangle = -\hbar\, |2,-1\rangle \\ \hat{L}_z |2,-2\rangle = -2\hbar\, |2,-2\rangle \end{cases}$$

نکاتی درباره Y_{ℓ, m_ℓ} ها

$$\langle r,\theta,\phi \,|\, n,\ell,m_\ell \rangle = \psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\phi) \Longleftrightarrow \langle \theta,\phi \,|\, \ell, m_\ell \rangle = Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\varphi)$$

مثال $\quad Y_{00}(\theta,\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$\ell \swarrow \quad \searrow m_\ell$

Y_{01} نداریم $\quad Y_{02}$ نداریم

$\boxed{\text{نکته: } |m_\ell| \leq \ell}$

۳_ طبق تعریف $\psi^*(r,\theta,\phi)\,\psi(r,\theta,\phi)$ چگالی حضور ذره در نقطه با مختصات r,θ,ϕ است

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)\,Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$$

$$\psi^*\psi = R^*R\,\underbrace{Y^*_{l,m_l}\,Y_{l,m_l}}$$

چگالی حضور ذره در موقعیت فضایی با زاویه θ,ϕ

چک کردن چگالی حضور برای Y_{00}

$$\psi^*_{n00}\,\psi_{n00} = R^*_n R_n\,\underbrace{Y^*_{00}\,Y_{00}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{4\pi}$$

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi} Y^*_{00}\,Y_{00}\,\sin\theta\, d\theta\, d\phi = 1$$

در هیچ جایی روی سطح کره صفر نمی‌شود

$$Y^*_{00}\,Y_{00} = \frac{1}{4\pi}$$

$$\frac{1}{4\pi}\underbrace{\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\theta\, d\theta\, d\phi}=1$$

$$\underbrace{\frac{1}{4\pi}\int d\Omega = 1}$$

$$\frac{1}{4\pi}\,4\pi = 1$$

لذا Y_{00} همان $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ است

۴

$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

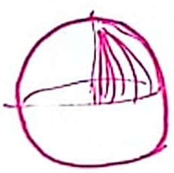
احتمال حضور ذره برای وضعیتی که تابع موج زاویه‌ای آن با Y_{00} داده شود، مستقل از θ و ϕ است ← مانند اوربیتال S که توزیع مکانی الکترون‌ها در آن وابستگی زاویه‌ای ندارد

سوال: یک زاویه‌ای ذره برای بصورت زیر است

$$|\psi\rangle = |0,0\rangle$$

الف) احتمال اینکه ذره در ناحیه $0\leq\theta\leq\pi/2$ باشد چقدر است ← $1/2$

ب) احتمال اینکه ذره در ربع اول فضا باشد چقدر است؟ ← $1/8$



توابع موج زاویه‌ای برای $l=1$

$$Y_{11}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,e^{i\phi}\sin\theta \longrightarrow Y_{11}^{*}Y_{11}\sim\sin^2\theta$$

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \longrightarrow Y_{10}^{*}Y_{10}\sim\cos^2\theta$$

$$Y_{1-1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,e^{-i\phi}\sin\theta \longrightarrow Y_{1-1}^{*}Y_{1-1}\sim\sin^2\theta$$

توزیع زاویه‌ای وابسته به θ

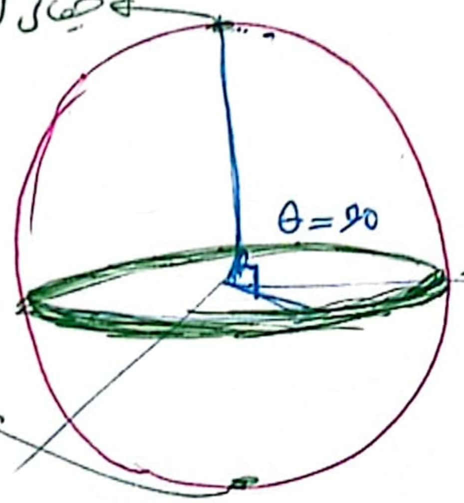
مستقل از ϕ است

← معادل اوربیتال P هستند

۵

توزیع فضایی ذره با تابع موج فضایی Y_{11}

احتمال حضور ذره $\sim \sin^2\theta$



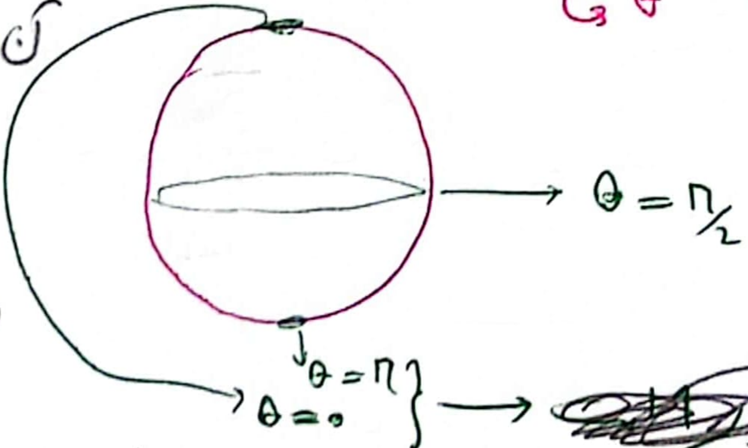
* احتمال حضور روی این کمربند از همه جاها بیشتر است
* هر چه به سمت قطب‌ها می‌رویم احتمال حضور ذره کم‌تر می‌شود $\theta \to \pi$ یا $\theta \to 0$
* در قطب‌ها $\theta = 0$ و $\theta = \pi$ جایی که حضور ذره صفر است
* احتمال به زاویه ϕ بستگی ندارد.
* Y_{1-1} از رفتار مشابه برخوردار است

Y_{10}

توزیع فضایی ذره با تابع موج فضایی

احتمال حضور ذره $\sim \cos^2\theta$

Y_{10} که بخش θ آن چند جمله‌ای مرتبه اول لژاندر برحسب $\cos\theta$



$\theta = \pi/2$: جایی که احتمال، لذا احتمال صفر است

$\theta = 0$, $\theta = \pi$: ~~جایی که احتمال~~ جایی که احتمال لذا احتمال بیشترین مقدار را دارد

٩

توابع سطح برای اوربیتال d ($l=2$)

$$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\, e^{2i\phi} \sin^2\theta \equiv \langle \theta, \phi | 2,2 \rangle$$

$$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, e^{i\phi} \sin\theta \cos\theta \equiv \langle \theta, \phi | 2,1 \rangle$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\, (3\cos^2\theta - 1) \equiv \langle \theta, \phi | 2,0 \rangle$$

$$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, e^{-i\phi} \sin\theta \cos\theta \equiv \langle \theta, \phi | 2,-1 \rangle$$

$$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\, e^{-2i\phi} \sin^2\theta \equiv \langle \theta, \phi | 2,-2 \rangle$$

تمرین،

الف) چگالی احتمال را برای اوربیتال d حساب کنید

ب) چگالی احتمال را برای هر یک از اوربیتال‌های d حساب کنید و تعیین کنید چگالی حضور ذره در کدام زاویه‌ها بیشترین مقدار و در کدام نواحی کمترین مقدار هستند

V

توابع موج برای $l=3$

$$Y_{33} = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\, e^{3i\phi} \sin^3\theta \equiv \langle \theta, \phi | 3, 3 \rangle$$

$$Y_{32} = \sqrt{\frac{105}{64\pi}}\, e^{2i\phi} \sin^2\theta \cos\theta \equiv \langle \theta, \phi | 3, 2 \rangle$$

$$Y_{31} = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\, e^{i\phi} \sin\theta \,(5\cos^2\theta - 1) \equiv \langle \theta, \phi | 3, 1 \rangle$$

$$Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\, (5\cos^3\theta - 3\cos\theta) \equiv \langle \theta, \phi | 3, 0 \rangle$$

$$Y_{3\,-1} = \cdots\cdots \equiv \langle \theta, \phi | 3, -1 \rangle$$

$$Y_{3\,-2} = \cdots\cdots \equiv \langle \theta, \phi | 3, -2 \rangle$$

$$Y_{3,-3} = \cdots\cdots \equiv \langle \theta, \phi | 3, -3 \rangle$$

تمرین: جای خالی در عبارت های بالا را پر کنید.

تمرین: چگالی احتمال را برای ذره با تابع موج زاویه‌ای با $l=3$ (هر یک از حالات فوق) را جداگانه تحلیل کنید.

مثال/

۸

$$\underbrace{\hat{L}_z |1,1\rangle = \hbar |1,1\rangle}$$

تحقیق این رابطه

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\phi}\sin\theta\right) = i\hbar\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,(i)\,e^{i\phi}\sin\phi$$

$$= \hbar\left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\phi}\sin\phi\right)$$

اثبات شد

$$\hat{L}_z |2,1\rangle = \hbar |2,1\rangle$$

تمرین: نشان دهید:

مثال/ کت زاویه‌ای سامانه به صورت زیر است

$$|\alpha\rangle = A|1,0\rangle + \frac{3}{5}|2,-1\rangle$$

الف) کت را نرمالیزه کنید

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \implies AA^*\overset{1}{\langle 1,0|1,0\rangle} + \frac{9}{25}\overset{1}{\langle 2,-1|2,-1\rangle}$$

$$\langle l,m_l|l',m_l'\rangle = \delta_{ll'}\,\delta_{m_l m_l'} \qquad + \cancel{\frac{3}{5}A^*\langle 1,0|2,-1\rangle + \frac{3}{5}A\langle 2,-1|1,0\rangle}$$

$$= 1$$

$$A^2 + \frac{9}{25} = 1 \qquad A^2 = \frac{16}{25}$$

$$A = \frac{4}{5} \quad \text{or} \quad A = -\frac{4}{5}$$

9

ب) اثر $\hat{L}_z|\alpha\rangle$

$$\hat{L}_z|\alpha\rangle = \hat{L}_z\left(\frac{4}{5}|1,0\rangle + \frac{3}{5}|2,-1\rangle\right)$$

فرمول مهم

$$\boxed{\hat{L}_z|l,m_l\rangle = m_l\hbar|l,m_l\rangle}$$

$$= \frac{4}{5}\hat{L}_z|1,0\rangle + \frac{3}{5}\hat{L}_z|2,-1\rangle$$

$$= \frac{4}{5}(0) + \frac{3}{5}(-\hbar)|2,-1\rangle$$

$$= -\frac{3}{5}\hbar|2,-1\rangle$$

ج) اثر $\hat{L}^2|\alpha\rangle$

$$\hat{L}^2|\alpha\rangle = \hat{L}^2\left(\frac{4}{5}|1,0\rangle + \frac{3}{5}|2,-1\rangle\right)$$

$$\boxed{L^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle}$$

فرمول مهم

$$= \frac{4}{5}\hbar^2(1)(1+1)|1,0\rangle + \frac{3}{5}\hbar^2(2)(2+1)|2,-1\rangle$$

$$= \frac{8}{5}\hbar^2|1,0\rangle + \frac{18}{5}\hbar^2|2,-1\rangle$$

د) احتمال اینکه در اندازه‌گیری $\hat{L}_z$ مقدار ۰ بدست آید چقدر است

$$\frac{4}{5}|1,0\rangle + \frac{3}{5}|2,-1\rangle$$

$L_z=0$

$L=-1$

احتمال $\frac{16}{25}$

احتمال $\frac{9}{25}$

و چنانچه L_z را اندازه‌گیری و مقدار ۰ بدست آمد کت حالت چه خواهد شد

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |1,0\rangle$$

۱۰

هـ) حاصل $\langle \hat{L}_z \rangle$ چقدر است.

$$\langle \alpha | \hat{L}_z | \alpha \rangle = \left(\frac{4}{5} \langle 1,0| + \frac{3}{5} \langle 2,-1| \right) \left(-\frac{3}{5} \hbar |2,-1\rangle \right)$$

از قسمت الف سوال

$$= -\frac{12}{25} \langle 1,0|2,-1\rangle - \frac{9}{25} \langle 2,-1|2,-1\rangle$$

$$= 0 - \frac{9}{25} = -\frac{9}{25}$$

روش دوم: استفاده از جواب قسمت د

$$(0) \times \frac{16}{25} + (-1) \times \frac{9}{25} = -\frac{9}{25}$$

تمرین: در این مثال حاصل $\langle \hat{L}^2 \rangle$ را بنویسید

تمرین: تابع موج مثال قبل را بنویسید.

$$\psi(\theta, \phi) = ?$$

تمرین: احتمال اینکه ذره در تیکه بالایی باشد چقدر است؟

تمرین: احتمال اینکه ذره در ربع اول دستگاه مختصات باشد چقدر است؟

11

نمایش عملگرهای تکانه زاویه‌ای مداری:

سوال: شکل ماتریسی $\hat{L}_z$ و $\hat{L}^2$ چگونه است...

به عدد کوانتومی l بستگی دارد

در حالت کلی ماتریس‌ها نامتناهی هستند

محاسبات را برای $l=1$ انجام می‌دهیم

به عبارتی در زیرفضای $l=1$ انجام می‌دهیم

* m_l را با m نشان می‌دهیم تا در نگارش خلاصه‌نویسی کرده باشیم

$l=0 \longrightarrow m=0$

$l=1 \longrightarrow m=1,0,-1$

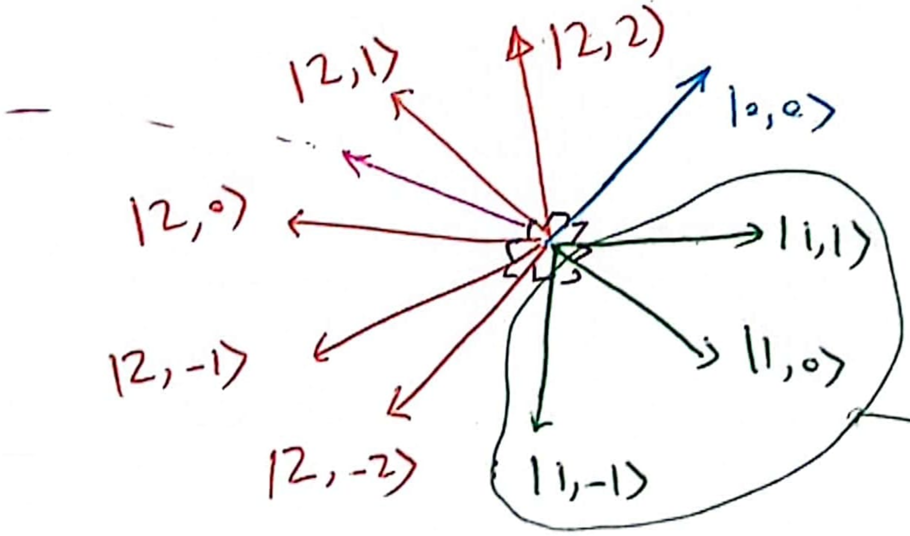
$l=2 \longrightarrow m=2,1,0,-1,-2$

$l=3 \longrightarrow m=3,2,1,0,-1,-2,-3$

$\vdots$

$l=4$

$l=3$



$$\langle l,m|l',m'\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

زیرفضای $l=1$

$$\langle 1,m|1,m'\rangle=\delta_{mm'}$$

۱۳

$$\hat{L}_z = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

سوال: شکل برداری $|1,1\rangle$ را بنویسید

$$\hat{L}_z|1,1\rangle = \hbar|1,1\rangle$$

لذا کت $|1,1\rangle$ ویژه بردار $\hat{L}_z$ با ویژه مقدار $\hbar$ است

$$\begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$x = 1$
$y = 0$
$z = 0$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{[illegible]}$$

[illegible]

تمرین:

شکل برداری $|1,0\rangle$ و $|1,-1\rangle$ را بنویسید

تمرین: برای مثال زیر $|\alpha\rangle = \frac{4}{5}|1,0\rangle + \frac{3}{5}|1,-1\rangle$

الف) شکل برداری $|\alpha\rangle$ را بنویسید

ب) $\langle \hat{L}_z \rangle$ را در نمایش ماتریسی حساب کنید.

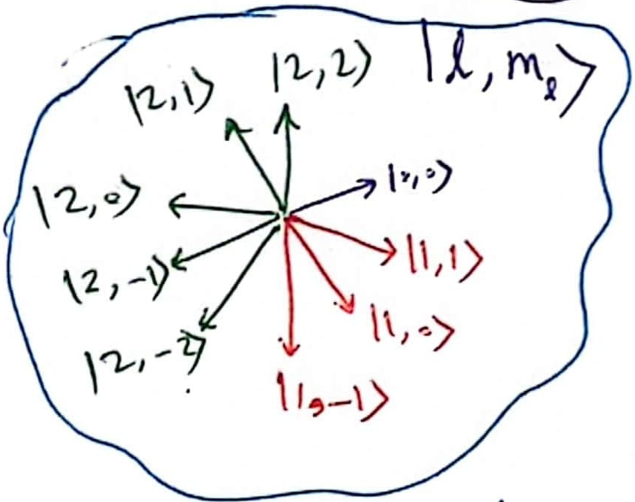
ج) $\langle \hat{L}^2 \rangle$ را در نمایش ماتریسی حساب کنید.

مهلت تحویل تمرین ها تا 2 هفته آینده

تمرین: مهم:

شکل ماتریسی $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ را برای $l=1$ بنویسید. (از تمرین های این جلسه بعد استفاده می شود)

$\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\} \longrightarrow$ ویژه بردارهایشان تشکیل پله‌های فضا را می‌دهند



$$\text{if } l=1 \Rightarrow \begin{cases} \hat{L}^2 = \begin{pmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{pmatrix} \\ \hat{L}_z = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} \end{cases}$$

عملگرهای نردبانی

عملگر خلق - بالابرنده

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \longrightarrow$$ حساب عملگرهای نردبانی را بررسی کنید

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

عملگر فنا - پایین کشنده

* این دو عملگر مشاهده‌پذیر فیزیکی نیستند (ابزار ریاضی)
* این دو عملگر همیوغ (دگر) یکدیگرند

$$\begin{cases} \hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_- \\ \hat{L}_-^\dagger = \hat{L}_+ \end{cases}$$

* این دو عملگر با عملگر $\hat{L}_z$ جابجا نمی‌شوند

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$$ تمرین: اثبات کنید

نکته ⟵ $|l,m\rangle$ ها ویژه بردارهای $\hat{L}_\pm$ نخواهند بود.

لذا $\hat{L}_\pm$ اگر روی $|l,m\rangle$ ها اثر کند آنها را تغییر می‌دهند.

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$$

این دو عملگر با $\hat{L}^2$ جابجا می‌شوند

سوال: حاصل $\hat{L}_+|l,m\rangle$ چیست؟

دقیق‌تر بپرسیم: l مشخص باشد ⇐ $-l \le m \le l$

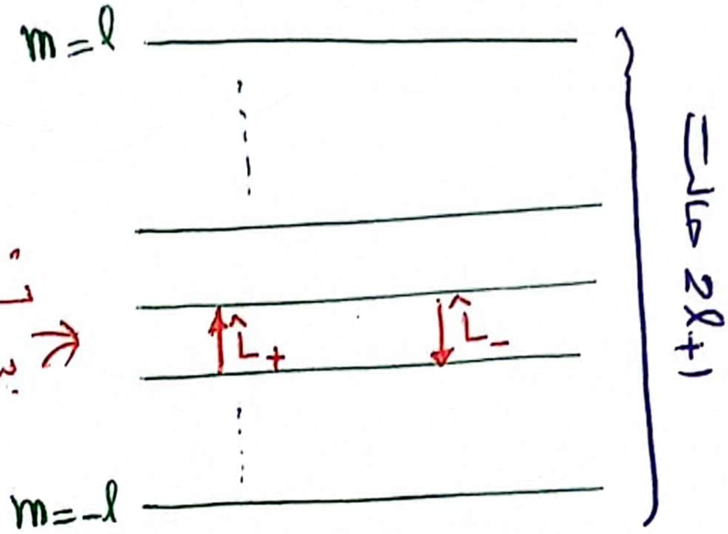
(از این جمله به بعد از نوشتن اندیس l در m_l خودداری می‌کنیم)

$2l+1$ بردار در فضا داریم

⇓

$2l+1$ حالت داریم

نشان می‌دهیم که $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ ما را بین این حالت‌ها جابجا می‌کنند →



اثبات:

$$\hat{L}_+|l,m\rangle = ?$$

بردار حاصل راستای متفاوت از $|l,m\rangle$ دارد.

ابتدا ببینیم مولفه z بردار حاصل چقدر است

$$\hat{L}_z(\hat{L}_+|l,m\rangle) = (\hat{L}_z\hat{L}_+ + \hat{L}_+\hat{L}_z - \hat{L}_+\hat{L}_z)|l,m\rangle$$

$$= ([\hat{L}_z, \hat{L}_+] + \hat{L}_+\hat{L}_z)|l,m\rangle$$

$$= \hbar\hat{L}_+|l,m\rangle + \hat{L}_+\hat{L}_z|l,m\rangle = \hbar\hat{L}_+|l,m\rangle + m\hbar\hat{L}_+|l,m\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z(\hat{L}_+|l,m\rangle) = \hbar(m+1)\hat{L}_+|l,m\rangle$$

۳ $\hat{L}_z(\hat{L}_+|l,m\rangle) = (m+1)\hbar(\hat{L}_+|l,m\rangle)$

نتیجه: بردار $\hat{L}_+|l,m\rangle$ ویژه‌بردار $\hat{L}_z$ با ویژه‌مقدار $(m+1)\hbar$ است

از طرفی می‌دانیم:

$$\hat{L}_z\underbrace{|l,m+1\rangle} = (m+1)\hbar|l,m+1\rangle$$

ویژه‌بردار $\hat{L}_z$ با ویژه‌مقدار $(m+1)\hbar$ است

لذا $\hat{L}_+|l,m\rangle$ در امتداد $|l,m+1\rangle$ است

* $\hat{L}_+$ حالت $|l,m\rangle$ را به $|l,m+1\rangle$ تبدیل می‌کند

$$\boxed{\hat{L}_+|l,m\rangle = C^+|l,m+1\rangle}$$

نکته: $\hat{L}_+$ هنگام اثر گذاشتن مقدار l را تغییر نمی‌دهد

ضریب

قبل از یافتن C^+ به سوال زیر نیز پاسخ دهیم بد نخواهد بود

سوال: تکانه زاویه‌ای کل بردار $\hat{L}_+|l,m\rangle$ چقدر است؟

$$\hat{L}^2(\hat{L}_+|l,m\rangle) = \hat{L}^2\underbrace{\hat{L}_+}|l,m\rangle$$

جا به جا پذیرند

$$\hat{L}_+\hat{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)\hat{L}_+|l,m\rangle$$

لذا

$$\hat{L}^2(\hat{L}_+|l,m\rangle) = \hbar^2 l(l+1)(\hat{L}_+|l,m\rangle)$$

از طرفی

$$\hat{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle$$

لذا $\hat{L}_+$ تکانه زاویه‌ای کل $|l,m\rangle$ را تغییر نمی‌دهد

جمع‌بندی: اثر $\hat{L}_+$ روی $|l,m\rangle$

m را یک واحد افزایش می‌دهد

روی عدد کوانتومی l تأثیری ندارد

$$\hat{L}_+ |l,m\rangle = c^+ |l,m+1\rangle$$

سوال: ضریب c^+ را حساب کنید:

$$\langle l,m| \hat{L}_+^\dagger = \langle l,m+1| c^{+*}$$

$$\langle l,m| \hat{L}_- = \langle l,m+1| c^{+*}$$

طرفین این دو رابطه را در هم ضرب می‌کنیم

$$\langle l,m| \hat{L}_- \hat{L}_+ |l,m\rangle = \langle l,m+1|l,m+1\rangle c^+ c^{+*} = |c^+|^2$$

$$\langle l,m| (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) |l,m\rangle = |c^+|^2$$

$$\langle l,m| \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i\hat{L}_x\hat{L}_y - i\hat{L}_y\hat{L}_x + L_z^2 - L_z^2 |l,m\rangle = |c^+|^2$$

$$\langle l,m| \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] |l,m\rangle = |c^+|^2$$

$$\langle l,m| \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z |l,m\rangle = |c^+|^2$$

$$\left(\hbar^2 l(l+1) - m^2\hbar^2 - m\hbar^2\right)\langle l,m|l,m\rangle = |c^+|^2$$

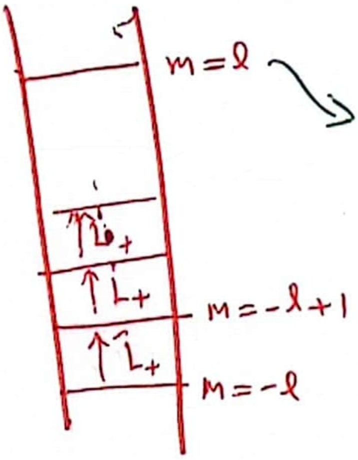
$$\boxed{c^+ = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}}$$

در اکثر کتاب‌ها $\quad c^+ = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}$

مثلا،

$$\hat{L}_+|l,m\rangle = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\;|l,m+1\rangle$$

نکته



$$\xrightarrow{} |l,l\rangle \Rightarrow \boxed{\hat{L}_+|l,l\rangle = 0}$$

شکل دیفرانسیلی

$$\hat{L}_+ Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\; Y_{l,m+1}(\theta,\varphi)$$

تمرین ← همین کارها را برای عملگرها انجام دهید

$$\hat{L}_-|l,m\rangle = c^-|l,m-1\rangle$$ نشان دهید که،

$$c^- = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$ نشان دهید که،

$$\hat{L}_-|l,-l\rangle = 0$$ نشان دهید که،

4

مثال، حاصل $\hat{L}_+|2,1\rangle$ را حساب کنید

$$l=2\ ,\ m=1 \Rightarrow C^+=\hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}$$
$$=\hbar\sqrt{(2-1)(2+1+1)}$$
$$=2\hbar$$

$$\hat{L}_+|2,1\rangle=2\hbar|2,2\rangle$$

تمرین: دو مثال از عملگرهای خلق و فنا طرح کنید و حل نمایید

بازگشت به معادله شرودینگر در دستگاه کروی

→ حل بخش شعاعی

$$① \quad \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]R(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)=0$$

باید پتانسیل مسئله شود که ارائه دهیم.

مثال، نوسانگر سه بعدی

$$V(\bar{r})=V(r)=\frac{1}{2}kr^2=\frac{1}{2}m\omega^2r^2\equiv\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)$$

تغییر متغیرهای زیر را می‌دهیم:

$$\rho=\alpha r^2\ ,\ \alpha=\frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\downarrow$$

$$r=\sqrt{\frac{\rho}{\alpha}}$$

$$\frac{d}{dr}=\frac{d\rho}{dr}\frac{d}{d\rho}=2\alpha r\frac{d}{d\rho}$$

$$② \quad r^2\frac{d}{dr}=r^2\,2\alpha r\frac{d}{d\rho}=2\alpha\sqrt{\frac{\rho}{\alpha}}\,\frac{\rho}{\alpha}\frac{d}{d\rho}=2\rho\frac{\sqrt{\rho}}{\sqrt{\alpha}}\frac{d}{d\rho}$$

$$③ \quad \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}=\frac{1}{r^2}2\alpha r\frac{d}{d\rho}=\frac{2\alpha}{r}\frac{d}{d\rho}=\frac{2\alpha\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\rho}}\frac{d}{d\rho}$$

۷

دوباره یک تغییر متغیر دیگری دهیم

$$④\; R(\rho) = \frac{y(\rho)}{\sqrt{\rho}}$$

جایگذاری روابط ② ، ③ ، ④ در معادله ① شده دیگه :

$$\frac{2\alpha\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\rho}}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{2\rho\sqrt{\rho}}{\sqrt{\alpha}}\frac{d}{d\rho}\right)\frac{y(\rho)}{\sqrt{\rho}} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right]\frac{y(\rho)}{\sqrt{\rho}} - \frac{l(l+1)}{r^2}\frac{y(\rho)}{\sqrt{\rho}} = 0$$

هیچ r ی نباید باقی بماند (همه برحسب ρ) :

$$\frac{4\alpha}{\sqrt{\rho}}\left[\rho\frac{d^2y}{d\rho^2}+\frac{1}{2}\frac{dy}{d\rho}\right] + \frac{2mE}{\hbar^2}\frac{y}{\sqrt{\rho}} - \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2\frac{\rho}{\alpha}\right)\frac{y}{\sqrt{\alpha}} - \frac{l(l+1)}{\rho}\frac{\alpha y}{\sqrt{\rho}} = 0$$

$$\xrightarrow{\times\frac{\sqrt{\rho}}{4\alpha}} \boxed{\left(\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{2}\frac{d}{d\rho}+\frac{mE}{2\alpha\hbar^2}-\frac{\rho}{4}-\frac{l(l+1)}{4\rho}\right)y(\rho)=0} \quad ⑤$$

$$y(\rho) = ?$$

ابتدا کمی به خصوصیات y بپردازیم.

از قبل می‌دانیم

بخش شعاعی $R(r)$ تابع موج $\longrightarrow \begin{cases} \lim\limits_{r\to\infty} R(r) = 0 \\ \lim\limits_{r\to 0} R(r) = \text{محدود} \end{cases}$

$$\rho = \alpha r^2$$

$$R(\rho) = \frac{y(\rho)}{\sqrt{\rho}} \longrightarrow \begin{cases} \lim\limits_{\rho\to\infty} R(\rho) \to 0 \\ \lim\limits_{\rho\to 0} R(\rho) \to \text{محدود} \end{cases}$$

باید داشته باشیم

۸

حدس: $y(\rho) = \rho^{\frac{(l+1)}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} F(\rho)$

$\rho^{\frac{(l+1)}{2}}$ ← حذف تکینگی در مبدأ

$\lim_{\rho \to 0} R \to$ محدود

$e^{-\frac{\rho}{2}}$ ← صفر شدن تابع موج در نواحی دور

$\lim_{\rho \to \infty} R \to 0$

$F(\rho) \to \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j$

که چندجمله‌ای که با یافتن a_jها ما $y(\rho)$ را پیدا خواهیم کرد

$$y(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{\frac{(l+1)}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^j$$

$$y(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{\frac{(l+2j+1)}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$$

از این رابطه $\frac{dy}{d\rho}$ و $\frac{d^2y}{d\rho^2}$ حساب می‌شود و در معادله ⑤ قرار می‌دهیم ⟵ تمرین: این محاسبات و جایگذاری را انجام دهید

$$\underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} a_j \left(\frac{l+2j+1}{2}\right)\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)\rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)} e^{-\frac{\rho}{2}}}_{①} - \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} a_j \left(\frac{l+2j+1}{2}\right) e^{\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)} e^{-\frac{\rho}{2}}}_{②}$$

$$+ \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{4} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j+3}{2}\right)} e^{-\frac{\rho}{2}}}_{③} + \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2} a_j \left(\frac{l+2j+1}{2}\right)\rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)} e^{-\frac{\rho}{2}}}_{④}$$

$$- \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{4} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)} e^{-\frac{\rho}{2}}}_{⑤} + \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{mE}{2\alpha\hbar^2} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)} e^{-\rho/2}}_{⑥}$$

$$- \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{4} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j+3}{2}\right)} e^{-\frac{\rho}{2}}}_{⑦} - \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{l(l+1)}{4} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)} e^{-\rho/2}}_{⑧} = 0$$

* $e^{-\frac{\rho}{2}}$ از معادلات حذف می‌شود
* جملات ③ , ⑦ باهم حذف می‌شوند
* جملات ① , ④ , ⑧ باهم فاکتورگیری می‌شوند
* جملات ② , ⑤ , ⑥ باهم فاکتورگیری می‌شوند

$$\rightarrow \sum_{j=0}^{\infty}\left\{ a_j \rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)}\left[\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)-\frac{l(l+1)}{4}\right]\right.$$

$$\left.+a_j \rho^{\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)}\left[-\frac{(l+2j+1)}{2}-\frac{1}{4}+\frac{mE}{2\alpha\hbar^2}\right]\right\}=0$$

for $l=0,1,2,\ldots$

یادآوری به گذشته: نوسانگر سه بعدی در دستگاه کارتزین

$n_x, n_y, n_z \longrightarrow$ اعداد کوانتومی

$$E_{n_x,n_y,n_z}=\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

$$=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

در دستگاه کروی

$n, l, m_l \longrightarrow$ اعداد کوانتومی

$E_{n,l} \longrightarrow$ انرژی نوسانگر به عدد کوانتومی m بستگی ندارد

تمرین: دلیل این امر را بیان کنید.

از مقدمه‌ی مکانیک $E_{n,l}$ را حساب می‌کنیم (دلیل را بعداً متوجه می‌شویم)

$$\underbrace{E_{n,l} \equiv \left(2n+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega}_{\text{بعداً خواهیم دید چرا؟}} = \left(\bar{n}+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

$$E_{n,l} = 2n\hbar\omega + l\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\xrightarrow{\times \frac{m}{2\alpha\hbar^2}} \quad \frac{mE_{n,l}}{2\alpha\hbar^2} = \frac{m2n\hbar\omega}{2\alpha\hbar^2} + \frac{ml\hbar\omega}{2\alpha\hbar^2} + \frac{m3\hbar\omega}{2\alpha\hbar^2}$$

$$\xrightarrow{\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}} \quad \frac{mE_{n,l}}{2\alpha\hbar^2} = n + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}$$

خواهیم دید که حل معادله صفحه قبل منوط به انتخاب فوق است لذا اینکه چرا $E_{n,l} = \left(2n+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$ است را پاسخ داده‌ایم

ادامه حل معادله صفحه قبل:

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)}\left[\dots\right] + a_j \rho^{\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)}\left[-\left(\frac{l+2j+1}{2}\right) - \frac{1}{4} + \frac{mE}{2\alpha\hbar^2}\right] = 0$$

جایگذاری از رابطه بالا

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)}\left[\dots\right] + a_j \rho^{\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)}\left[-\cancel{\frac{l}{2}} - j - \frac{1}{2} - \cancel{\frac{1}{4}} + n + \cancel{\frac{l}{2}} + \cancel{\frac{3}{4}}\right] = 0$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)}\left[\dots\right] + a_j\left[n-j\right]\rho^{\left(\frac{l+2j+1}{2}\right)} = 0$$

به عنوان تمرین حل بشود

$$\underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)}\left[j\left(l+j+\tfrac{1}{2}\right)\right]}_{\text{به ازای } j=0 \text{ صفر است، می‌تواند از } j=1 \text{ شروع شود}} + \underbrace{\sum_{j=1}^{\infty} a_{j-1}\left[n-j+1\right]\rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)}}_{\text{حدود را عوض کرده‌ایم}} = 0$$

$$\sum_{j=1}^{\infty}\left[a_j\, j\left(l+j+\tfrac{1}{2}\right)+a_{j-1}(n-j+1)\right]\rho^{\left(\frac{l+2j-1}{2}\right)}=0$$

$$a_j=\frac{-(n-j+1)}{j\left(l+j+\frac{1}{2}\right)}\,a_{j-1}\implies\begin{cases} j=1 & a_1=\dfrac{-n}{l+\frac{3}{2}}\,a_0 \\ j=2 & a_2=\dfrac{-(n-2+1)}{2\left(l+2+\frac{1}{2}\right)}\,a_1=\dfrac{(n-1)n}{2\left(l+\frac{5}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)}\,a_0 \\ j=3 & \\ \vdots & \end{cases}$$

بعداً با این بخش کار داریم (I)

لذا با داشتن a_0 بقیه ضرایب حساب می‌شوند

$$F(\rho)=a_0+a_1\rho+a_2\rho^2+a_3\rho^3+\cdots$$

جملات سری باید جایی قطع شوند

	a_0	$a_1\rho$	$a_2\rho^2$	$a_3\rho^3$			
$n=0\longrightarrow$	✓	✗	✗	✗	✗	✗	✗
$n=1\longrightarrow$	✓	✓	✗	✗	✗	✗	✗
$n=2\longrightarrow$	✓	✓	✓	✗	✗	✗	✗

برای اینکه ضرایب a_j (را که نوشته ایم) صفر شود با شرط اینکه $a_0\neq 0$

باید عدد کوانتومی n عددی صحیح و مثبت شود سپس سری F محدود می‌شود

$R(r)$ در $r\to\infty$ همگرا می‌شود

۱۲

جمع نبدی ــــ ∞ ــــ n محدود ⟸ $F(\rho)$ چند جمله‌ای از مرتبه n است

$$F_n^{l+\frac{1}{2}}(\rho) = a_0 + \frac{-n}{l+\frac{1}{2}+1} a_0 \rho + \frac{(n-1)(n)}{2(l+\frac{1}{2}+2)(l+\frac{1}{2}+1)} a_0 \rho^2 + \cdots + \bigcirc \rho^n$$

$l+\frac{1}{2} \to \alpha$

$$= L_n^{l+1/2}(\rho)$$

چند جمله‌ای لاگر

محدود: n, l, m را فراموش نکنیم

$n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

$l = 0, 1, 2, 3, \ldots$

$m = -l, \ldots, l$

$$n = 0, \quad a_0 = 1 \to \begin{cases} L_0^{0+1/2} = 1 \\ L_0^{1+1/2} = 1 \\ L_0^{l+1/2} = \cdots \end{cases}$$

$L_0^{(\alpha)}(\rho) = 1$ ⟵ جمع نبدی

$$n = 1, \quad \begin{cases} a_0 = \frac{3}{2} & L_1^{0+1/2} = \frac{3}{2} - \rho \\ a_0 = \frac{5}{2} & L_1^{1+1/2} = \frac{5}{2} - \rho \end{cases}$$

جمع نبدی ⟵

$$L_1^{(\alpha)}(\rho) = (\alpha+1) - \rho$$

$L_n^{(\alpha)}(0) = \frac{(n+\alpha)!}{n!\,\alpha!}$ تعریف کلی

جمع نبدی نوسانگر سه بعدی (در مختصات کروی)

ضریب بهنجارش

$$\boxed{\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) = \frac{\rho^{(l+1/2)} e^{-\frac{\rho}{2}} L_n^{l+1/2}(\rho)}{\sqrt{\rho}} \bigcirc\, Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) = \bigcirc \frac{r^{l+1} e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} L_n(\alpha r^2)}{r} Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) \equiv |n,l,m_l\rangle}$$

$$E_{n,l,m_l} = (2n+l+3/2)\hbar\omega \qquad n, l = 0, 1, 2, \ldots$$

$$n=2 \quad L_2^{(\alpha)}(\rho) = \frac{(\alpha+1)(\alpha+2)}{2} - (\alpha+2)\rho + \frac{\rho^2}{2} \implies$$ مقدار a_0 خود

①

تابع موج نوسانگر هماهنگ سه بعدی در دستگاه‌های کارتزین و کروی

کارتزین

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) \propto e^{-\frac{\alpha(x^2+y^2+z^2)}{2}} H_{n_x}(\sqrt{\alpha}x)\, H_{n_y}(\sqrt{\alpha}y)\, H_{n_z}(\sqrt{\alpha}z) \equiv \langle x,y,z|n_x n_y, n_z\rangle$$

$$\mathcal{E}_{n_x,n_y,n_z} = (\overbrace{n_x+n_y+n_z}^{n}+\tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

کروی

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) \propto r^l e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} L_n^{l+\frac{1}{2}}(\alpha r^2)\, Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) \equiv \langle r,\theta,\varphi|n,l,m_l\rangle$$

$$\rho^{\frac{l}{2}} = (\alpha r^2)^{l/2} \propto r^l$$

$$\mathcal{E}_{n,l,m_l} = (\overbrace{2n+l}^{n}+\tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

حالت پایه →

کارتزین: $\psi_{000} = |000\rangle \propto e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$ $\quad E_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$

$e^{-\frac{\alpha(x^2+y^2+z^2)}{2}}$

کروی: $\psi_{000} = |000\rangle \propto e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$ $\quad E_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$

اولین حالت برانگیخته

کارتزین:

$$\begin{cases} \psi_{100}(x,y,z) \longleftrightarrow |100\rangle \\ \psi_{010}(x,y,z) \longleftrightarrow |010\rangle \\ \psi_{001}(x,y,z) \longleftrightarrow |001\rangle \end{cases} \quad E = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

کروی:

$$\begin{cases} \psi_{011}(r,\theta,\varphi) \longleftrightarrow |011\rangle \\ \psi_{01-1}(r,\theta,\varphi) \longleftrightarrow |01-1\rangle \\ \psi_{010}(r,\theta,\varphi) \longleftrightarrow |010\rangle \end{cases} \quad E = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

نکات: دقت به توابع موج در دستگاه کروی و کارتزین ⟵ ارتباط بین آنها (۲)

$$\psi_{010}(r,\theta,\varphi) \propto r\,\underbrace{L_0^{3/2}(\alpha r^2)}_{\text{عدد}}\, e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\, \underbrace{Y_{10}(\theta,\varphi)}_{\cos\theta} \simeq r e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\cos\theta$$

$$\psi_{001}(x,y,z) \propto e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\, \underbrace{H_0(\sqrt{\alpha}x)}_{1}\, \underbrace{H_0(\sqrt{\alpha}y)}_{1}\, \underbrace{H_1(\sqrt{\alpha}z)}_{\sqrt{\alpha}z} \simeq z e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$$

$$\psi_{011}(r,\theta,\varphi) \propto r\,\underbrace{L_0^{3/2}(\alpha r^2)}_{\text{عدد}}\, \underbrace{Y_{11}(\theta,\varphi)}_{\sin\theta e^{i\varphi}}\, e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \simeq r e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\sin\theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{01-1}(r,\theta,\varphi) \propto r\,\underbrace{L_0^{3/2}(\alpha r^2)}_{\text{عدد}}\, \underbrace{Y_{1-1}(\theta,\varphi)}_{\sin\theta e^{-i\varphi}}\, e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} \simeq r e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\sin\theta e^{-i\varphi}$$

$$\psi_{100}(x,y,z) \propto e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\, \underbrace{H_1(\sqrt{\alpha}x)}_{\sqrt{\alpha}x}\, \underbrace{H_0(\sqrt{\alpha}y)}_{1}\, \underbrace{H_0(\sqrt{\alpha}z)}_{1} \simeq x e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$$

$$\psi_{010}(x,y,z) \propto e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}\, \underbrace{H_0(\sqrt{\alpha}x)}_{1}\, \underbrace{H_1(\sqrt{\alpha}y)}_{\sqrt{\alpha}y}\, \underbrace{H_0(\sqrt{\alpha}z)}_{1} \simeq y e^{-\frac{\alpha r^2}{2}}$$

$$\psi_{011}(r,\theta,\varphi) + \psi_{01-1}(r,\theta,\varphi) \simeq e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} r\sin\theta\,(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}) = 2e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} r\sin\theta\cos\varphi$$

$$= 2x e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} = 2\psi_{100}(x,y,z)$$

$$\psi_{100}(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{011}(r,\theta,\varphi) + \psi_{01-1}(r,\theta,\varphi)\right]$$

تمرین: نمونه های از این ارتباط را در منابع جستجو کنید و برای جلسه آینده تحویل دهید.

۳

مثال/ یک حالت نوسانگر در دستگاه کروی به صورت زیر است:

$$|\alpha\rangle = \frac{3}{5}|000\rangle + \frac{4i}{5}|01\,{-1}\rangle$$

الف) مقدار چشمداشتی انرژی را حساب کنید.

$$\langle \hat{H} \rangle = \left(\frac{3}{5}\langle 000| - \frac{4i}{5}\langle 01\,{-1}|\right)\hat{H}\left(\frac{3}{5}|000\rangle + \frac{4i}{5}|01\,{-1}\rangle\right)$$

$$= \frac{9}{25}\langle 000|\hat{H}|000\rangle + 0 + 0 + \frac{16}{25}\langle 01\,{-1}|\hat{H}|01\,{-1}\rangle$$

but $\rightarrow$ $\hat{H}|n,l,m\rangle = (2n+l+\frac{3}{2})\hbar\omega|n,l,m\rangle$

$$= \frac{9}{25}\times\frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{16}{25}\times\frac{5}{2}\hbar\omega = \frac{107}{50}\hbar\omega$$

تمرین

ب) $\hat{L}^2|\alpha\rangle$

ج) $\langle \hat{L}^2 \rangle$

د) $\langle \hat{L}_z \rangle$ ، $\langle \hat{L}_x \rangle$ ، $\langle \hat{L}_y \rangle$

و) احتمال اینکه در اندازه‌گیری انرژی عدد $\frac{3}{2}\hbar\omega$ بدست آید چقدر است؟

ه) احتمال اینکه در اندازه‌گیری مؤلفه z تکانه زاویه‌ای مداری عدد $-\hbar$ بدست آید چقدر است؟

(۴)

تابع موج ذره آزاد در دستگاه کروی ← پر از جزئیات

$V(r)=0 \longrightarrow$ no potential

تابع موج ← بخش زاویه‌ای → $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$

تابع موج ← بخش شعاعی → $V(r)$ را صفر قرار دهیم → معادله

$V(r)=0$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mE}{\hbar^2}R(r)-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R(r)=0$$

تعریف می‌کنیم : $\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\left(k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R(r)=0$$

تعریف می‌کنیم : $\rho=kr$

معادلات را برحسب ρ بازنویسی می‌کنیم ← تمرین

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR(\rho)}{d\rho}\right)+\left(1-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)R(\rho)=0$$

سوال ← $R(\rho)=R(kr)=\,??$

← چون هیچ قیدی بر روی K نداریم ⇐ قیدی روی E نداریم

لذا انرژی متعلق پیوسته است

← تابع موج بخش شعاعی به عدد ℓ وابسته است

→ معادله بسل

معادله بسل ← جواب $R(\rho)$ توابع بسل کروی است

- حقیقی
  - بسل نوع ۱ $j_\ell(\rho)$
  - بسل نوع ۲ $n_\ell(\rho) \equiv y_\ell(\rho)$ ← توابع نیومن
- مختلط
  - هنکل نوع ۱ $h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + i n_\ell(\rho)$
  - هنکل نوع ۲ $h_\ell^{(2)}(\rho) = j_\ell(\rho) - i n_\ell(\rho)$

مشابه ← $\cos kx, \sin kx$ حقیقی / $e^{\pm ikx}$ مختلط

توجه: برای ذره آزاد در مختصات کارتزین

باید توابعی را انتخاب کنیم که ویژگی های تابع موج را داشته باشد

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}$$

$\vdots$

$$n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}$$

$\vdots$

اما

$\rho \to 0 \begin{cases} j_0 \to 1 \to \text{خوش‌رفتار} \\ j_{\ell\neq 0} \to 1 \to \text{خوش‌رفتار} \\ n_\ell \to \infty \to \text{بدرفتار} \end{cases}$

$\rho \to \infty \begin{cases} j_\ell(\rho) \to 0 \quad \text{خوش‌رفتار} \\ n_\ell(\rho) \to 0 \quad \text{خوش‌رفتار} \end{cases}$

← $j_\ell(\rho)$ ها مناسبند برای تابع موج ذره آزاد

(4)

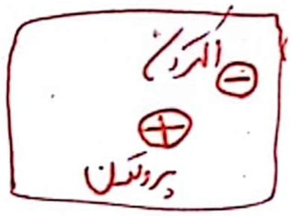
$$\Longrightarrow R_l(\rho) = R_l(kr) = j_l(kr)$$

ذره آزاد سه بعدی:

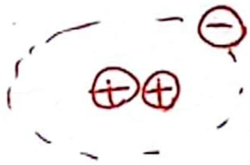
- کروی: $\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) \propto j_l(kr)\, Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$
- کارتزین: $\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

Hydrogen-like atom

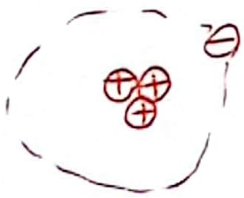
اتم هیدروژن



H $Z=1$

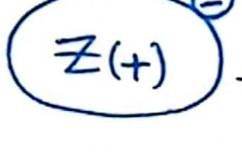


He^+ $Z=2$



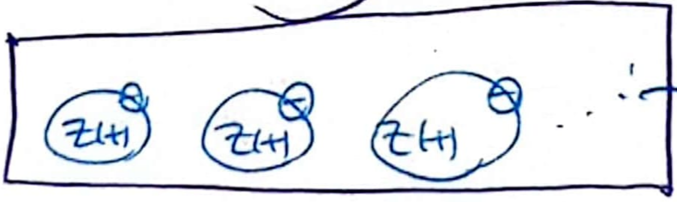
Li^{2+} $Z=3$

- - - . .



→ H-like atom

ممکن است سامانه متشکل از تعداد زیادی H-like atom باشد



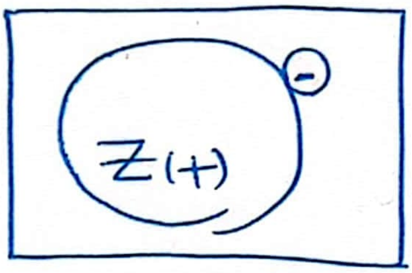
→ $i\,N$

⑦ قدم اول در حل مسئله نوشتن هامیلتونی است

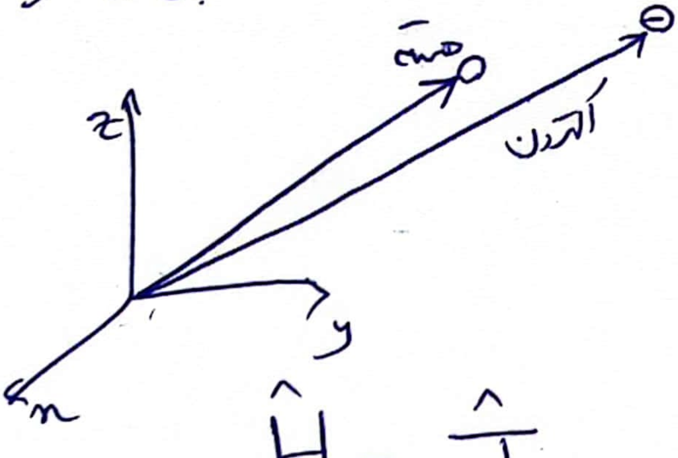
$$\hat{H} = \underbrace{\hat{T}}_{\text{انرژی جنبشی هسته‌ها}} + \underbrace{\hat{T}}_{\text{انرژی جنبشی الکترون‌ها}} + \underbrace{\hat{V}}_{\text{برهم‌کنش الکترون-الکترون}} + \underbrace{\hat{V}}_{\text{برهم‌کنش پروتون-پروتون}} + \underbrace{\hat{V}}_{\text{برهم‌کنش الکترون-پروتون}}$$

کار پروتون‌ها   N،   N، $\frac{N(N-1)}{2}$ $\frac{N(N-1)}{2}$ $\frac{N(N-1)}{2}$

بسیار سخت است ⟵ فرض فقط یک اتم داریم



مشابه سامانه دوجسمی در مکانیک کلاسیک



$m_e \sim 9.1\times10^{-31}$ kg

$m_p \sim 1.6\times10^{-27}$ kg

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{T}}_{\text{انرژی جنبشی هسته}} + \underbrace{\hat{T}}_{\text{انرژی جنبشی الکترون}} + \underbrace{\hat{V}}_{\text{برهم‌کنش الکترون هسته}}$$

روش ۱: $\hat{H} = \underbrace{\hat{T}}_{\text{الکترون}} + \underbrace{\hat{V}}_{\text{الکترون هسته}}$ ⟶ پروتون‌ها ساکن و از انرژی جنبشی آنها صرف‌نظر می‌کنیم

روش ۲: $\hat{H} = \underbrace{\hat{H}}_{\text{مرکز جرم}} + \underbrace{\hat{H}}_{\text{حول مرکز جرم}}$

۸

روش را

$$\hat{V}(\bar{r}) = V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$Ze_{(+)}$ — $-e$

انرژی پتانسیل بار $-e$ در فاصله r از بار Ze

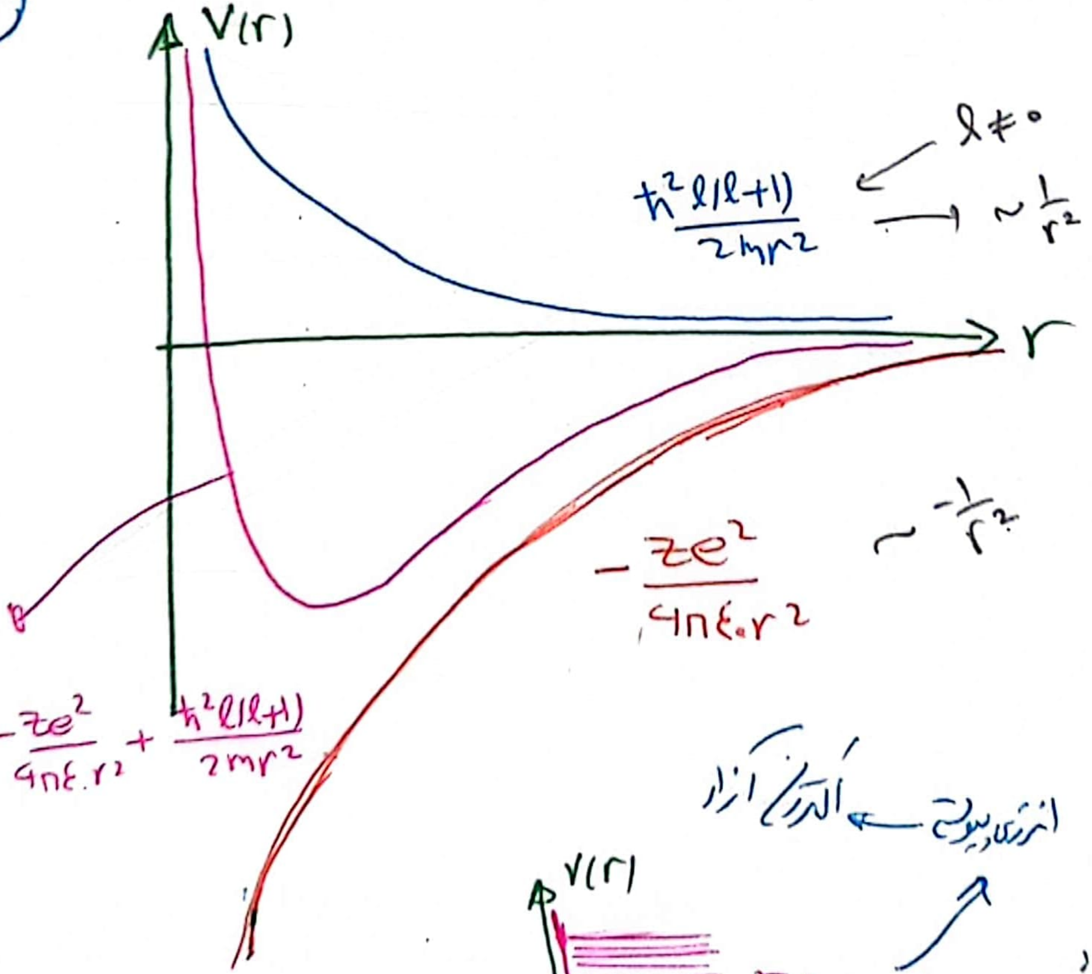
پاسخ بخش زاویه‌ای همان هارمونیک‌های کروی $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ است.

پاسخ بخش شعاعی $R(r) = ?$

معادله شعاعی

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \hbar^2\frac{l(l+1)}{2mr^2}\right)\right]R(r) = 0$$

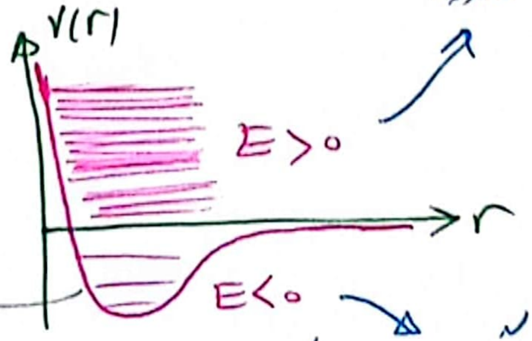
(1)



$$V_{eff} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

انرژی پیوسته ← الکترون آزاد

نکته:



از اینجا قید داریم

انرژی گسسته ← الکترون مقید

(9)

حل معادله شعاعی

تغییر متغیر : $\rho = \sqrt{\dfrac{8m|E|}{\hbar^2}}\, r$

بدون بعد است

$$(1) \longrightarrow \frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R(\rho) + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)R(\rho) = 0 \quad (2)$$

$$\lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}\sqrt{\frac{m}{2|E|}} \xrightarrow{\times \frac{\sqrt{c^2}}{c}} \lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 c}\sqrt{\frac{mc^2}{2|E|}}$$

$\alpha = 1/137$

$$\lambda = Z\alpha\sqrt{\frac{mc^2}{2|E|}}$$

حالات حدی معادله

در حد ρ بزرگ: $\dfrac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} + 0 + 0 + \left(0 - \dfrac{1}{4}\right)R(\rho) = 0$

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} - \frac{R(\rho)}{4} = 0 \quad (3)$$

جواب معادله روبرو

$$\rho \longrightarrow \infty \Longrightarrow \boxed{R(\rho) \simeq e^{-\frac{\rho}{2}}}$$

لذا می‌توان گفت $R(\rho)$ به صورت زیر است:

$$R(\rho) = G(\rho)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$$

تابع G نقش اساسی در رفتار $R(\rho)$ را ایفا در $\rho \to 0$ دارد

جاگذاری

$$\frac{d^2G}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right)\frac{dG}{d\rho} + \left[\frac{(\lambda - 1)}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]G = 0 \quad (4)$$

(10)

حالت حدی

$$\rho \to 0 : \quad \frac{d^2G}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dG}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}G = 0$$

جواب معادله فوق ← $\boxed{G(\rho) \sim \rho^{l}}$

لذا شکل کلی $G(\rho)$ به صورت زیر خواهد بود

$$G(\rho) = \rho^{l}\, H(\rho)$$

(4) بایستی صدق کند ← تا بتوانند در معادله

چند جمله ای که به دنبال آن (ضرایب) خواهیم بود

$$H(\rho) = \sum_k a_k \rho^k = a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3 + \cdots$$

$$\Longrightarrow R(\rho) = \rho^{l} e^{-\frac{\rho}{2}} H(\rho)$$

$G(\rho)$ را در معادله (4) جایگذاری می کنیم

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \Big[\underbrace{k(k-1)\rho^{k-2}}_{} + k\left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right)\rho^{k-1} + (\lambda - l - 1)\rho^{k-1}\Big] = 0$$

تغییر محدوده + فاکتورگیری

ρ^{k-1} بایستی در بالا فاکتور گرفته شود — بالا در جمله مربوط به فاکتورگیری شود

$\rightarrow k \rightarrow k+1 \rightarrow \sum_{k=-1}^{\dots}$ — تغییر متغیر دادیم

این ترم حذف می شود $\sum_{k=0}^{\infty}$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho^{k-1}\underbrace{\Big[(k+2l+2)(k+1)a_{k+1} + (\lambda - 1 - l - k)a_k\Big]}_{=0} = 0$$

$$\boxed{a_{k+1} = \frac{-(\lambda - 1 - l - k)}{(k+2l+2)(k+1)}\, a_k}$$

→ a_0 معلوم شود بقیه ضرایب معلوم شد

$R \Leftarrow G \Leftarrow H$ بایستی خوش رفتار باشد لذا سری بایستی یک جا قطع شود

(11)

$$H(\rho)=a_0+a_1\rho+a_2\rho^2+a_3\rho^3+\dots+a_{n_r}\rho^{n_r}+a_{n_r+1}\rho^{n_r+1}+\dots$$

سوال: در چه صورت این جملات تا آخر صفر می‌شوند؟

جواب: اگر $a_{n_r+1}=0$ شود ← $H(\rho)$ چند جمله‌ای درجه n_r ام خواهد شد.

but
$$\boxed{a_{n_r+1}=\frac{-(\lambda-1-l-n_r)}{(n_r+2l+2)(n_r+1)}\,a_{n_r}}$$

لذا اگر a_{n_r} صفر نباشد باید ضریب آن صفر شود تا جملات با مرتبه بیشتر از n_r در سری صفر شوند

$$\lambda-1-l-n_r=0 \Rightarrow \lambda=n_r+l+1$$

پیامدها

چون n_r و l اعداد صحیح مثبت (کوانتیده) هستند

لذا λ کوانتیده خواهد بود. $n_r, l=0,1,2,3,\dots$ ⇐ $\lambda=1,2,3,\dots$

چون E (انرژی) با λ متناسب است، انرژی کوانتیده خواهد بود

★ عدد کوانتمی n را به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$n=n_r+l+1$$

نکته: ① چون کمترین مقدار l و n_r برابر صفر است لذا کمترین مقدار n برابر با 1 است ⇐ $n=1,2,3,\dots$

② مطابق با رابطه فوق [illegible] ⇐ می‌توان نوشت: $n\ge l+1$

★★★ لذا مقدار l محدودیت دارد: $\boxed{l\le n-1}$ → $l<n$

$$l=0,1,2,\dots,n-1$$

③ برای عدد کوانتمی m نیز تبعیت همان قبلی است: $m=-l,\dots,+l$

سوال: انرژی؟ ← $\lambda-n=0$ ⇐ $\lambda=n$ ⇐ $\boxed{Z\alpha\sqrt{\dfrac{mc^2}{2|E|}}=n}$

$n=1,\ l=0 \Rightarrow$ (*) , (**) حالت پایه ،

$1 = Z\alpha\sqrt{\frac{mc^2}{2|E_1|}} \Rightarrow E_1 = -\frac{1}{2}\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{1^2} = -13.6\ eV$

تراز n ام اتم هیدروژن گونه

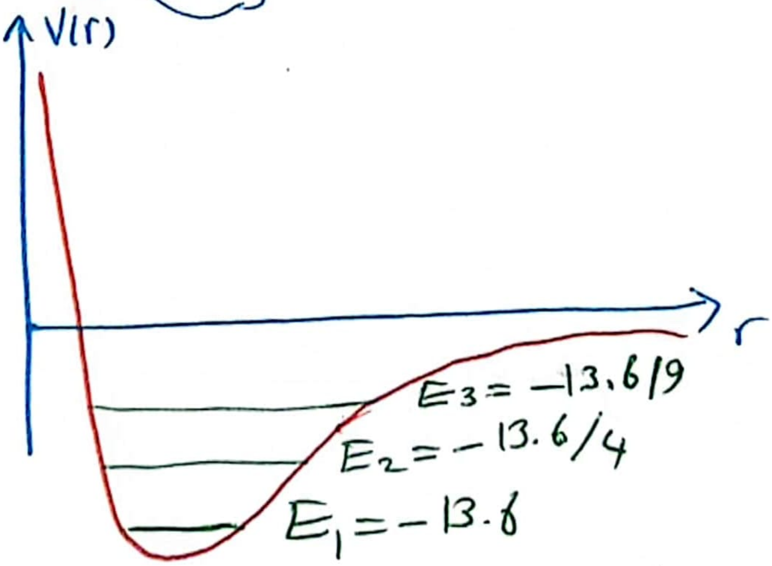
$(*) = (**) \Rightarrow n = Z\alpha\sqrt{\frac{mc^2}{2|E|}}$

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{n^2}$$

اتم هیدروژن $Z=1$

$$\boxed{E_n = \frac{-13.6}{n^2}} \rightarrow \boxed{E_n = \frac{E_1}{n^2}\ ,\ E_1 = -13.6\ eV}$$

* نکته: انرژی فقط به عدد کوانتومی n وابسته است و به l , m ربطی ندارد.



$n=1 \rightarrow$ حالت پایه

$n=2 \rightarrow$ اولین حالت برانگیخته

$n=3 \rightarrow$ دومین حالت برانگیخته

۱۳

$H(\rho)$ چند جمله‌ای از مرتبه n_r با تعداد گره n_r

تعلق به مدل بور

شکل تابع موج شعاعی

$$R_{n,l}(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l} \left(a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \cdots + a_{n_r}\rho^{n_r} \right)$$

$$\star \; n_r = n - l - 1 \; \star$$

تابع موج اتم هیدروژن گونه

$$\Psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) = A R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$$

ضریب بهنجارش

$$n = n_r + l + 1$$

$$E_n = -\frac{13.6\ \text{ev}}{n^2} = -\frac{mc^2 (Z\alpha)^2}{2n^2} \quad \alpha = 1/137$$

انرژی به n بستگی دارد و مستقل از l و m است

حالت پایه $n=1$ $E=-13.6$

$l=0 \rightarrow m_l=0$ $\Psi_{100}(r,\theta,\varphi) \rightarrow H(\rho)=a_0=1$

$n_r=0$

ناتبهگن

چند جمله‌ای مرتبه صفر

$R_{10}(\rho)$ تغییر را اعمال کنیم

اولین حالت برانگیخته $n=2$ $E=-\frac{13.6}{4}$

$n_r=0$

$l=1 \rightarrow \begin{cases} m_l=1 & \Psi_{211}(r,\theta,\varphi) \\ m_l=0 & \Psi_{210}(r,\theta,\varphi) \\ m_l=-1 & \Psi_{21-1}(r,\theta,\varphi) \end{cases} \rightarrow H(\rho)=a_0=1$

چند جمله‌ای مرتبه صفر

$n_r=1$

$l=0 \rightarrow m_l=0$ $\Psi_{200}(r,\theta,\varphi) \rightarrow H(\rho)=a_0+a_1\rho$

$$a_{k+1} = \frac{-\lambda+1-l+k}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$$

چند جمله‌ای مرتبه اول

$a_0=1$ $a_1=-\frac{1}{2}$ $\rightarrow H(\rho) = 1-\frac{\rho}{2}$

تبهگنی مرتبه ۴ دارد

۱۴

درمین حالت برانگیخته $n=3$

$n_r=2 \rightarrow \ell=0 \rightarrow m_\ell \rightarrow 0 \quad \psi_{300} \rightarrow H(\rho)=1-\rho+\frac{\rho^2}{6}$

$n_r=1 \rightarrow \ell=1 \rightarrow \begin{cases} m_\ell=1 & \psi_{311} \\ m_\ell=0 & \psi_{310} \\ m_\ell=-1 & \psi_{31-1} \end{cases} \quad H(\rho)=1-\frac{\rho}{4}$

$n_r=0 \rightarrow \ell=2 \rightarrow \begin{cases} m_\ell=2 & \psi_{322} \\ m_\ell=1 & \psi_{321} \\ m_\ell=0 & \psi_{320} \\ m_\ell=-1 & \psi_{32-1} \\ m_\ell=-2 & \psi_{32-2} \end{cases} \quad H(\rho)=1$

تبهگنی مرتبه ۹

تمرین: نشان دهید تبهگنی تراز n ام از مرتبه n^2 است

* مهم *

1

تابع موج حالت پایه اتم هیدروژن

$$\underbrace{n=1\ ,\ l=0}\Rightarrow R(r)=?$$

$$n_r=0\longrightarrow\begin{cases}H(\rho)=1\\ G(\rho)=\rho^{l}=1\\ R(\rho)=e^{-\frac{\rho}{2}}\end{cases}\qquad \begin{aligned}&G(\rho)=H(\rho)\rho^{l}\\ &R(\rho)=G(\rho)e^{-\rho/2}\end{aligned}$$

but $\rho=\sqrt{\dfrac{8m|E_1|}{\hbar^2}}\qquad |E_1|\to\left|-\dfrac{1}{2}\dfrac{mc^2(Z\alpha)^2}{1^2}\right|=\dfrac{1}{2}mc^2Z^2\alpha^2$

$$R(r)=\exp\left(-\sqrt{\frac{8m}{\hbar^2}\frac{1}{2}mc^2Z^2\alpha^2}\ \frac{r}{2}\right)$$

$$=\exp\left(-\frac{2m}{\hbar}cZ\alpha\frac{r}{2}\right)$$

$$=\exp\left(-rZ\frac{mc\alpha}{\hbar}\right)$$

but $a_0=\dfrac{\hbar}{mc\alpha}\equiv 0.529\times10^{-10}\,m=0.529\,\text{Å}$ شعاع بوهر

مهمترین شعاع بوهر بر حسب آنگستروم و بر حسب نانومتر را بنویسید.

$$\Longrightarrow R_{10}(r)=e^{-Z\frac{r}{a_0}}$$

اتم هیدروژن $\rightarrow Z=1\Rightarrow R_{10}(r)=e^{-\frac{r}{a_0}}$

۲

نرمالیزاسیون تابع موج

المان حجم

$$\int_{r=0}^{\infty}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\psi(r,\theta,\varphi)\,\psi^*(r,\theta,\varphi)\,dV=1$$

$$\iiint \psi\psi^*\, r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi=1$$

$$\psi_{\underset{n\,l\,m}{100}}(r,\theta,\varphi)=A R_{10} Y_{00}\longrightarrow \psi^*_{100}=A^* R^*_{10} Y^*_{00}$$

$$\int_{r=0}^{\infty}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} A^2 |R_{10}|^2 |Y_{00}|^2 r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi=1$$

$$\int_0^{\infty} A^2 r^2 |R_{10}|^2 dr \overbrace{\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}|Y_{00}|^2\, d\Omega}^{=1}=1$$

$$A^2\int_0^{\infty} r^2|R_{10}|^2 dr=1 \Rightarrow A^2\int_0^{\infty} r^2 e^{-2Z\frac{r}{a_0}}dr=1$$

$$A=2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$$

* انتگرال حتما گرفته شود.

۳

H-like atom $R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-Z\frac{r}{a_0}}$

اتم هیدروژن $R_{10}(r) = \frac{2}{(a_0)^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \longrightarrow \psi_{100} = \frac{2}{\sqrt{4\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$

توابع بخش شعاعی برای H-like atom

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-Z\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(1 - Z\frac{r}{2a_0}\right) e^{-Z\frac{r}{2a_0}}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0}\, e^{-Z\frac{r}{2a_0}}$$

$$R_{30}(r) = 2\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2}\right] e^{-Z\frac{r}{3a_0}}$$

$$R_{31}(r) = 4\,\frac{\sqrt{2}}{3}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left[\frac{Zr}{a_0}\right]\left[1 - \frac{Zr}{6a_0}\right] e^{-Z\frac{r}{3a_0}}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left[\frac{Zr}{a_0}\right]^2 e^{-Z\frac{r}{3a_0}}$$

تمرین: تابع موج اتم هیدروژن را برای $n=1,2,3$ از مراجع رونویسی نمایید
و آن را ارسال کنید

۴

اتم هیدروژن و نمادگذاری اسپکتروسکوپی

حالت پایه $\quad E_1 = -13.6\,eV \quad \psi_{100}(r,\theta,\varphi) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) e^{-\frac{r}{a_0}} \longrightarrow 1s \quad (n=1,\ l=0)$

اولین حالت برانگیخته

$$E_2 = -13.6/4 \quad n=2, \begin{cases} l=0, & \{ m=0, \ \psi_{200} = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a_0}\right)\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ & n=2 \leftarrow 2s \leftarrow l=0 \\ l=1, & \begin{cases} m=1, \ \psi_{21\pm1} = \frac{1}{8}\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \\ m=-1 \quad n=2 \leftarrow 2p \leftarrow l=1 \\ m=0 \end{cases} \end{cases}$$

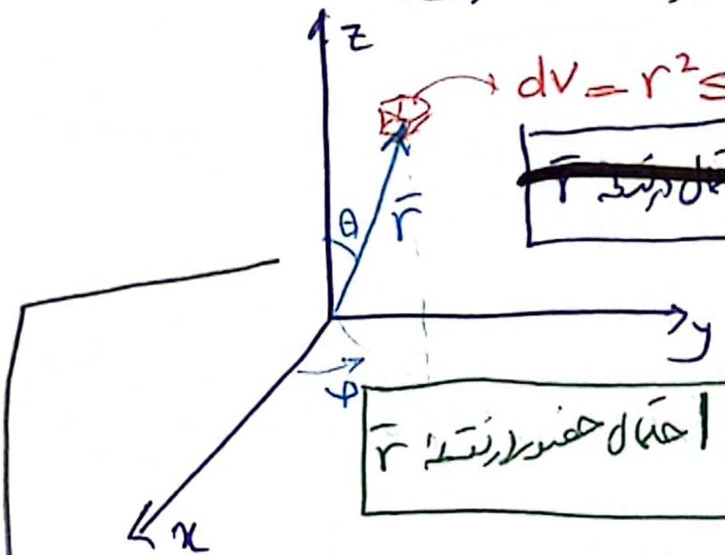
$$\psi_{210} = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{1/2}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta$$

$$n=2 \leftarrow 2p \leftarrow l=1$$

دومین حالت برانگیخته

$$E_3 = -13.6/9 \quad n=3 \begin{cases} l=0 \ \{ m=0 \longrightarrow \psi_{300} \longrightarrow 3s \\ l=1 \begin{cases} m=1 \longrightarrow \psi_{311} \longrightarrow 3p \\ m=-1 \longrightarrow \psi_{31-1} \longrightarrow 3p \\ m=0 \longrightarrow \psi_{310} \longrightarrow 3p \end{cases} \\ l=2 \begin{cases} m=\pm2 \longrightarrow \psi_{32\pm2} \longrightarrow 3d \\ m=\pm1 \longrightarrow \psi_{32\pm1} \longrightarrow 3d \\ m=0 \longrightarrow \psi_{320} \longrightarrow 3d \end{cases} \end{cases}$$

احتمال مشاهده الکترون در المان حجم dV در نقطه $\bar{r}$ از فضا



$$dV = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi = r^2 \, dr \, d\Omega$$

~~$\bar{r}$ چگالی احتمال در نقطه : $\psi^*_{nlm_l}(r,\theta,\varphi)\,\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)$~~

$\boxed{\text{احتمال حضور در نقطه } \bar{r} : \ \psi^*_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)\,\psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi)\,dV}$

but $\psi_{n,l,m_l} = R_{n_l}(r)\, Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) \longrightarrow \psi^*\psi : \underbrace{R^*_{nl}(r)\, R_{nl}(r)\, Y^*_{lm_l}(\theta,\varphi)\, Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)}$

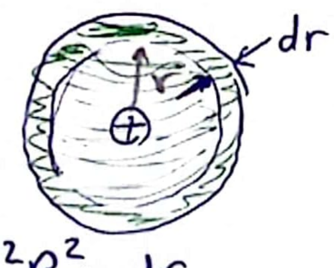
چگالی احتمال
- به r وابسته است ← همواره
- می‌تواند به θ هم وابسته باشد ← به l و m_l وابسته است
- به φ وابسته نیست

احتمال حضور در حجم dV حول نقطه $\bar{r}$ از فضا : $\underbrace{r^2 R^2_{n,l}(r)}_{\text{چگالی شعاعی}} \ \underbrace{\Theta^2(\theta)}_{\text{چگالی زاویه‌ای}} \ dr \, d\Omega$

$|Y(\theta,\varphi)|^2$ ، $\sin\theta \, d\theta \, d\varphi$

احتمال حضور الکترون در پوسته‌ای به ضخامت dr حول هسته

در فاصله r



$$r^2 R^2_{n_l}(r)\, dr$$

1

تمرین: $\Theta^2(\theta)\,d\theta$ چیست؟

حالت پایه: $1S$:

چگالی شعاعی: $r^2R_{10}^2 = r^2\,4\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{2r}{a_0}}$

چگالی زاویه‌ای: $\frac{1}{4\pi}$ وابستگی زاویه‌ای ندارد

احتمال حضور ذره فقط به فاصله آن از هسته بستگی دارد

البته هم: فاصله‌ای از هسته که احتمال حضور الکترون (ابر الکترونی) بیشترین مقدار را دارد

$$\frac{d}{dr}\left(r^2R_{10}^2(r)\right)=0 \Rightarrow \frac{d}{dr}\left(r^2e^{-\frac{2r}{a_0}}\right)=0$$

تمرین: این اکسترمم را بدست آورید؟

$r_{ext}=?$

$$2re^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{2}{a_0}r^2e^{-\frac{2r}{a_0}}=0 \Rightarrow 2\left(r-\frac{r^2}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}=0$$

اگر خیلی بسیار نزدیک به هسته ($r\to 0$) یا بسیار دور از هسته ($r\to\infty$) احتمال حضور ذره (مطابق شکل بالا چگالی احتمال) به سمت صفر میل می‌کند

$r=0$

$r=a_0$ ✓

$r=\infty$

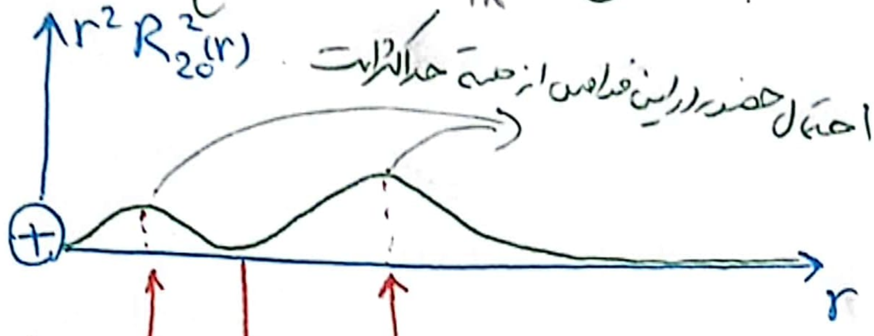
۷

اولین حالت برانگیخته :

2S $\xrightarrow{\psi_{200}}$

چگالی شعاعی : $r^2R_{20}^2 = r^2 4\left(\frac{1}{2a_0}\right)^3\left(1-\frac{r}{2a_0}\right) \times e^{-\frac{r}{a_0}}$

چگالی زاویه‌ای : $\frac{1}{4\pi}$ وابستگی زاویه‌ای ندارد



احتمال حضور در این فواصل از هسته حداکثر است

تمرین: حساب شود

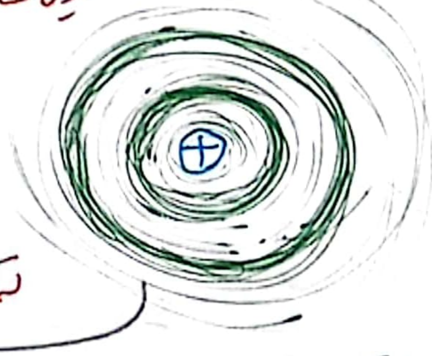
تمرین: حساب شود

آیا کمتر از a_0 است یا بیشتر؟؟

$2a_0$

احتمال حضور ذره در این فاصله صفر است

تمرین: حساب شود



اگر الکترون باشد تراز 1S ... تقارن کروی دارد اساس تراز گسسته از دو لایه تشکیل شده است

* احتمال حضور در $(r\to 0)$ و $(r\to\infty)$ و $(r=2a_0)$ به صفر میل می‌کند

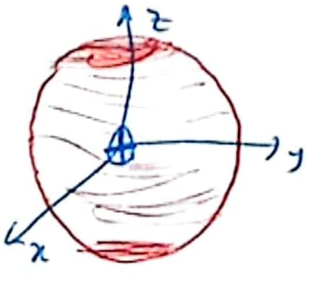
2p

ψ_{210} — ψ_{21-1} تمرین — ψ_{211} تمرین

ψ_{210}:

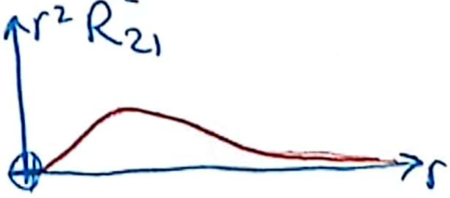
چگالی زاویه‌ای

$Y_{10}Y_{10}^* \simeq \Theta_{10}^2 \sim \cos^2\theta$



چگالی شعاعی

$r^2R_{21}^2(r)$

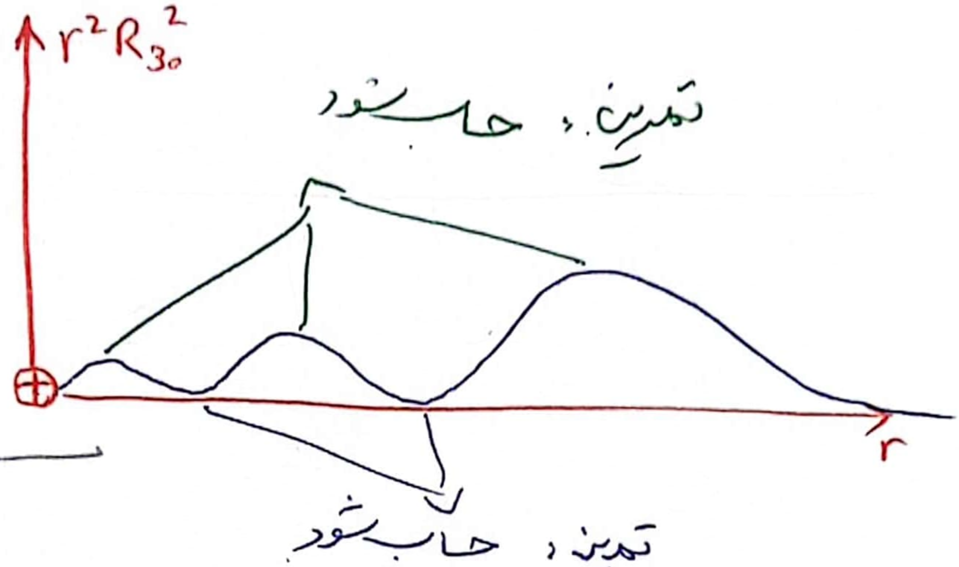


* فقط یک بیشینه دارد.

۸

در مش حالت برانگیخته

$$3S \xrightarrow{\psi_{300}} \begin{cases} \text{شعاعی}: r^2R_{30}^2 = r^2 4\left(\frac{1}{3a_0}\right)^3 e^{-r/a_0} \times \left[1-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27a_0^2}\right]^2 \\ \text{زاویه‌ای}: \frac{1}{4\pi} : \text{وابستگی ندارد} \end{cases}$$



به ازای الکترون کولنی
سه راس (۳ تا)
فقط ...

* احتمال حضور ذره در سه فاصله متناوب از هسته بیشترین مقدار است
* احتمال حضور ذره در $(0 \to r_1)$ ، $(r_1 \to r_2)$ و دو فاصله دیگر (شکل) به صفر میل می‌کند.

تمرین: برای ψ_{nlm} تعداد گره‌هایی که در بخش شعاعی چگالی احتمال وجود دارد چقدر است؟

بیشینه‌ها n تا

صفرها $n-1$ تا (به‌جز مبدأ)

$$3p \xrightarrow[\psi_{310}]{\psi_{31\pm1}} \quad \text{تمرین}$$

$$3d \begin{cases} \psi_{32\pm2} \\ \psi_{32\pm1} \\ \psi_{320} \end{cases} \longrightarrow \quad \text{تمرین}$$

9

مثال/ تابع موج الکترون در اتم هیدروژن به صورت زیر است

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\,\psi_{211} + \sqrt{3}\,\psi_{21-1}\right)$$

الف) تحقیق کنید که تابع موج نرمالیزه است ← از تعامد استفاده می‌کنیم

$$\langle\psi|\psi^*\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\frac{1}{\sqrt{10}}\left(2^2 + 1^2 + 2 + 3\right) = 1$$

ب) مقدار چشمداشتی انرژی چقدر است؟

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(2\langle 100| + \langle 210| + \sqrt{2}\langle 211| + \sqrt{3}\langle 21-1|\right)\hat{H}$$

$$\frac{1}{\sqrt{10}}\left(2|100\rangle + |210\rangle + \sqrt{2}|211\rangle + \sqrt{3}|21-1\rangle\right)$$

فقط ترم‌های غیر صفر نوشته شده. بقیه به خاطر تعامد صفر می‌شوند

$$= \frac{1}{10}\,2\underbrace{\langle 100|\hat{H}|100\rangle}_{E_1}2 + \frac{1}{10}\underbrace{\langle 210|\hat{H}|210\rangle}_{E_2}$$

$$+ \frac{1}{10}\sqrt{2}\underbrace{\langle 211|\hat{H}|211\rangle}_{E_2}\sqrt{2} + \frac{1}{10}\sqrt{3}\underbrace{\langle 21-1|\hat{H}|21-1\rangle}_{E_2}\sqrt{3}$$

$$= \frac{4}{10}(-13.6) + \frac{1}{10}\left(-\frac{13.6}{4}\right)$$

$$+ \frac{2}{10}\left(-\frac{13.6}{4}\right) + \frac{3}{10}\left(-\frac{13.6}{4}\right)$$

$\langle\hat{L}_z\rangle = ?$

$\langle\hat{L}^2\rangle = ?$

در صورت محاسبه L_z چه مقادیری ممکن است حاصل شود؟

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{22}{40}(-13.6)\,\mathrm{eV}$$

راه سریع:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\,\psi_{211} + \sqrt{3}\,\psi_{21-1}\right)$$

$$\langle E\rangle = \frac{4}{10}E_1 + \frac{1}{10}E_2 + \frac{2}{10}E_2 + \frac{3}{10}E_2$$

ج) احتمال اینکه الکترون در فاصله یک آنگستروم از هسته باشد چقدر است ۱۵

$$\downarrow$$

$$1\text{Å} = 10^{-10} m$$

$$\int_{r=0}^{10^{-10}} \boxed{\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi}} R^* R \, r^2 dr \, \boxed{d\Omega}$$

$$= 4\pi \int_{r=0}^{10^{-10}} r^2 \left(\frac{1}{10} 4 R_{10}^2 + \frac{1}{10} R_{21}^2 + \frac{2}{10} R_{21}^2 + \frac{3}{10} R_{21}^2 \right) dr$$

$$= \dots$$

د) احتمال اینکه در اندازه گیری مؤلفه Z تکانه زاویه ای مداری عدد صفر بدست آید؟

(تمرین)

ه) احتمال اینکه در اندازه گیری مؤلفه Z تکانه زاویه ای مداری عدد $\hbar$ بدست آید؟

مثال / اتم هیدروژن در حالت پایه را در نظر بگیرید. مقدار انتظاری
فاصله الکترون از هسته چقدر است؟

$$\psi = \psi_{100} \rightarrow \text{پایه}$$

$$\langle \hat{r} \rangle = \langle 100 | \hat{r} | 100 \rangle = \iiint \psi^*_{100}\, r\, \psi_{100}\, r^2 \sin\theta \, dr\, d\theta\, d\varphi$$

$$= \text{انتگرال گیری} = 1.5\, a_0$$

فرمول های مهم

$$\langle \psi_{n\ell m} | \hat{r} | \psi_{n\ell m} \rangle \equiv \langle n,\ell,m | \hat{r} | n,\ell,m \rangle = \frac{a_0}{2}\left[3n^2 - \ell(\ell+1)\right]$$

$$\langle \hat{r}^2 \rangle = \langle n,\ell,m | \hat{r}^2 | n,\ell,m \rangle = \frac{n^2 a_0^2}{2}\left[5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)\right]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \langle n,\ell,m | \frac{1}{r} | n,\ell,m \rangle = \frac{1}{a_0 n^2}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \langle n,\ell,m | \frac{1}{r^2} | n,\ell,m \rangle = \frac{1}{a_0^2 n^3 (\ell + \frac{1}{2})}$$

تمرین: برای مثال فوق حاصل طرفین عبارت زیر را از طریق فرمول های داده شده حساب کنید

$$\underbrace{\langle \hat{H} \rangle}_{\text{از انرژی اساسی}} = \underbrace{\langle \hat{V} \rangle + \langle \hat{T} \rangle}_{\text{از طریق فرمول های گفته شده}}$$

۱۲ اتم هیدروژن ــــ پاریته

$\hat{\Pi}$ یا $\hat{P}$ عملگر پاریته

پتانسیل متقارن $\Rightarrow$ if $V(x)=V(-x) \Rightarrow [\hat{H},\hat{\Pi}]=0$ $\Rightarrow$ توابع ویژه در پتانسیل زوج و فرد

از ترم چنانچه پتانسیل زوج باشد $\rightarrow V(-r)=V(r) \Rightarrow [\hat{H},\hat{\Pi}]=0$

$\Rightarrow$ چنانچه هامیلتونی با پاریته جابجا شود، توابع موج هامیلتونی یا زوج و یا فرد خواهند بود

اتم هیدروژن $\quad V(\bar{r}) = -\dfrac{K}{|\bar{r}|} = -\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{1}{|\bar{r}|}$

$\bar{r} \rightarrow -\bar{r}$

$$V(-\bar{r}) = -\frac{K}{|-\bar{r}|} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|-\bar{r}|}$$

$\Rightarrow V(\bar{r}) = V(-\bar{r})$

$[\hat{H},\hat{\Pi}]=0 \Rightarrow$ توابع موج زوج/فرد

$$\psi(-\bar{r}) = -\psi(\bar{r}) \qquad \psi(-\bar{r}) = \psi(\bar{r})$$

همگی می‌دانید؟

کارتزین
$$\begin{cases} x \rightarrow -x \\ y \rightarrow -y \\ z \rightarrow -z \end{cases} \Rightarrow$$
(x,y,z) و $(-x,-y,-z)$ قرینه یکدیگر نسبت به مبدأ مختصات

مهم

کروی
$$\begin{cases} r \rightarrow r \\ \theta \rightarrow \pi-\theta \\ \varphi \rightarrow \pi+\varphi \end{cases} \Rightarrow$$
(r,θ,φ) و $(r,\pi-\theta,\pi+\varphi)$ قرینه یکدیگر نسبت به مبدأ مختصات

$x = r\sin\theta\cos\varphi$

$r \rightarrow r$

$\theta \rightarrow \pi-\theta \Rightarrow \sin\theta \rightarrow +\sin\theta$

$\varphi \rightarrow \pi+\varphi \Rightarrow \cos\varphi \rightarrow -\cos\varphi$

$\rightarrow x \rightarrow -x$

۱۳/

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) \xrightarrow[\text{یا فرد است}]{\text{زوج است}} R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

زوج ⟵ تغییری نمی‌کند: $r \to r$

$$\Theta_{\ell m}(\theta)\, \Phi_m(\varphi)$$

زوج: اگر m زوج

فرد: اگر m فرد

$$\Phi_m(\varphi)=e^{im\varphi} \Rightarrow \Phi_m(\varphi+\pi)=e^{im(\varphi+\pi)}$$

$$= e^{im\varphi}e^{im\pi} = \Phi(\varphi)e^{im\varphi}$$

$$= \Phi(\varphi)(-1)^m$$

زوج است یا فرد؟

$$\Theta_{\ell m}(\theta) \propto \frac{d^{|m|}}{du^{|m|}} P_\ell(u)$$

چندجمله‌ای از مرتبهٔ $\ell-|m|$

if $\ell-|m| =$ زوج $\to \Theta_{\ell m} =$ زوج

if $\ell-|m| =$ فرد $\to \Theta_{\ell m} =$ فرد

جمع‌بندی

m زوج، ℓ زوج ؛ $\ell-|m|$ زوج $\to$ { $R_{n\ell}$ زوج ، Φ_m زوج ، $\Theta_{\ell m}$ زوج } $\to$ $\psi_{n\ell m}$ زوج

m فرد، ℓ زوج ؛ $|\ell|-m$ فرد $\to$ { $R_{n\ell}$ زوج ، Φ_m فرد ، $\Theta_{\ell m}$ فرد } $\to$ $\psi_{n\ell m}$ زوج

۱۴

$$\frac{m \text{ زوج}, \ l \text{ فرد}}{\underbrace{l-|m|}_{\text{فرد}}} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{ll} R_{nl} & \text{زوج} \\ \Phi_m & \text{زوج} \\ \Theta_{lm} & \text{فرد} \end{array} \right\} \longrightarrow \psi_{nlm_l} \ \text{فرد}$$

$$\frac{m \text{ فرد}, \ l \text{ فرد}}{\underbrace{|l|-|m|}_{\text{زوج}}} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{ll} R_{nl} & \text{زوج} \\ \Phi_m & \text{فرد} \\ \Theta_{lm} & \text{زوج} \end{array} \right\} \longrightarrow \text{فرد} \ \psi_{nlm}$$

تمرین: کت های زوج را مشخص کنید.

$|\psi_{100}\rangle \quad |\psi_{111}\rangle \quad |\psi_{11-1}\rangle$

$|\psi_{210}\rangle \quad |\psi_{200}\rangle \quad |\psi_{21-1}\rangle$

$|\psi_{543}\rangle \quad |\psi_{530}\rangle \quad |\psi_{53-1}\rangle$

تمرین: در راجع به زوج و فرد بودن حالت پایه، اول، دوم نوسانگر ساده بحث کنید.

$$j=L \Rightarrow \tau^{LL} + \tau^{1L} \rightarrow$$

$$j=1 \Rightarrow \tau^{1L} + \tau^{11} \rightarrow$$

$$j>1 \Rightarrow \tau^{jL} + \tau^{1j} \rightarrow$$

2 //

گرم

حالت خاص $T_L = T_1 = T_2^{eq} = \cdots = T_R \rightarrow J^{eq} = 0$

$$-B_*^{eq} \sum_{j=0}^{R} \left(\tau^{j1} + \tau^{Lj}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\sum_{j=0}^{R} \tau^{j1}}_{=0} + \underbrace{\sum_{j=0}^{R} \tau^{Lj}}_{=0} = 0 \quad \text{بدیهی}$$

$$\cancel{j<l<m \quad \rho_+^{j\rightarrow m}}$$

$$j<m \quad \hat{\rho}_+^{j\rightarrow m} = \rho_m + (\tau_m)^2 \hat{\rho}_+^{j\rightarrow m-1} \; \upsilon^{j\rightarrow m-1 m} \; e^{-2ik_z d_{m-1}}$$

$$j<\gamma \rightarrow \hat{\tau}_\gamma^j = \frac{|\tau^{j+1\rightarrow\gamma}|^2 \left(1-|\rho_+^{L\rightarrow j}|^2\right)\left(1-|\rho_-^{\gamma+1\rightarrow R}|^2\right)}{|1-\rho_+^{L\rightarrow\gamma}\rho_-^{\gamma+1\rightarrow R}|^2 \, |1-\rho_+^{L\rightarrow j}\rho_-^{j+1\rightarrow\gamma}|^2}$$

$$j=\gamma \rightarrow \hat{\tau}_\gamma^\gamma = \frac{\left(1-|\rho_+^{L\rightarrow\gamma}|^2\right)\left(1-|\rho_-^{\gamma+1\rightarrow R}|^2\right)}{|1-\rho_+^{L\rightarrow\gamma}\rho_-^{\gamma+1\rightarrow R}|^2}$$

$$j>\gamma \rightarrow \hat{\tau}_\gamma^j = \frac{|\tau^{\gamma+1\rightarrow j}|\left(1-|\rho_+^{L\rightarrow\gamma}|^2\right)\left(1-|\rho_-^{j+1\rightarrow R}|^2\right)}{|1-\rho_+^{L\rightarrow j}\rho_-^{j+1\rightarrow R}|^2 \, |1-\rho_+^{L\rightarrow\gamma}\rho_-^{\gamma+1\rightarrow j}|^2}$$

$$j,\gamma = L, 1, 2, \ldots, N \quad , \hat{\tau}_\gamma^R = 0$$

تقارن این فرایند!

$$\hat{\tau}^{j}_{\gamma} = \hat{\tau}^{\gamma}_{j} \qquad j,\gamma = L,1,2,\dots,N$$

٤

$$\text{for } j,l = 1,2,\dots,N \Longrightarrow \begin{cases} \tau^{Lj} = \hat{\tau}^{L}_{j-1} - \hat{\tau}^{L}_{j} \\ \tau^{lj} = \hat{\tau}^{l}_{j-1} - \hat{\tau}^{l-1}_{j-1} - \hat{\tau}^{l}_{j} + \hat{\tau}^{l-1}_{j} \\ \tau^{Rj} = -\hat{\tau}^{N}_{j-1} + \hat{\tau}^{N}_{j} \end{cases}$$

سوال اصلی ما $\Rightarrow \tau^{Lj} + \tau^{j1} = ?$

$$j = \underline{\underline{L}}, \underbrace{1,2,\dots,N}, \underline{\underline{R}}$$

$$\tau^{Lj} + \tau^{j1} = \left(\hat{T}^{L}_{j-1} - \hat{T}^{L}_{j}\right) + \left(\hat{T}^{j}_{L} - \hat{T}^{j-1}_{L} - \hat{T}^{j}_{1} + \hat{T}^{j-1}_{1}\right)$$

$$= \hat{T}^{L}_{j-1} - \hat{T}^{L}_{j} + \hat{T}^{L}_{j} - \hat{T}^{L}_{j-1} - \hat{T}^{1}_{j} + \hat{T}^{1}_{j-1}$$

$$= -\hat{T}^{1}_{j} + \hat{T}^{1}_{j-1}$$

$$j=1 \longrightarrow -\hat{T}^{1}_{1} + \hat{T}^{1}_{L} \simeq -\frac{\left(1-|\rho_{+}^{L\to 1}|^2\right)\left(1-|\rho_{-}^{2\to R}|^2\right)}{|1-\rho_{+}^{L\to 1}\rho_{-}^{2\to R}|^2} + \frac{|\tau^{1\to 1}|\left(1-|\rho_{+}^{L\to L}|^2\right)\left(1-|\rho_{-}^{2\to R}|^2\right)}{|1-\rho_{+}^{L\to 1}\rho_{-}^{2\to R}|^2\,|1-\rho_{+}^{L\to L}\rho_{-}^{1\to 1}|^2}$$

5

$$j=2 \rightarrow -\hat{T}^{1}_{2}+\hat{T}^{1}_{1} = -\frac{|\tau^{2\rightarrow 2}|^2 (1-|\rho_+^{L\rightarrow 1}|^2)(1-|\rho_-^{3\rightarrow R}|^2)}{|1-\rho_+^{L\rightarrow 2}\rho_-^{3\rightarrow R}|^2 \, |1-\rho_+^{L\rightarrow 1}\rho_-^{2\rightarrow 2}|^2} + \frac{(1-|\rho_+^{L\rightarrow 1}|^2)(1-|\rho_-^{2\rightarrow R}|^2)}{|1-\rho_+^{L\rightarrow 1}\rho_-^{2\rightarrow R}|^2}$$

$$j>2 \rightarrow -\hat{T}^{1}_{j}+\hat{T}^{1}_{j-1} = -\frac{|\tau^{2\rightarrow j}|^2 \left[(1-|\rho_+^{L\rightarrow 1}|^2)(1-|\rho_-^{j+1\rightarrow R}|^2)\right]}{|1-\rho_+^{L\rightarrow j}\rho_-^{j+1\rightarrow R}|^2 \, |1-\rho_+^{L\rightarrow 1}\rho_-^{2\rightarrow j}|^2} + \frac{|\tau^{2\rightarrow j-1}|^2 (1-|\rho_+^{L\rightarrow 1}|^2)(1-|\rho_-^{j\rightarrow R}|^2)}{|1-\rho_+^{L\rightarrow j-1}\rho_-^{j\rightarrow R}|^2 \, |1-\rho_+^{L\rightarrow 1}\rho_-^{2\rightarrow j-1}|^2}$$

تقریب خطی

$$J^{eq} = -\sum_{j=0}^{R} \theta_j (\tau^{j1}+\tau^{Lj})$$

$$= -\theta_b(\tau^{L1}+\tau^{LL}) - \theta_1(\tau^{11}+\tau^{L1}) - \sum_{j=2}^{N-1}\theta_j(\tau^{j1}+\tau^{Lj}) - \theta_N(\tau^{N1}+\tau^{LN}) - \theta_b(\tau^{R1}+\tau^{LR})$$

θ_b | θ_1 —— θ_N | θ_b

$$\theta_1 = \theta_b + \frac{\Delta T}{2}\frac{\partial \theta_1}{\partial T}$$

$$\theta_N = \theta_b - \frac{\Delta T}{2}\frac{\partial \theta_b}{\partial T}$$

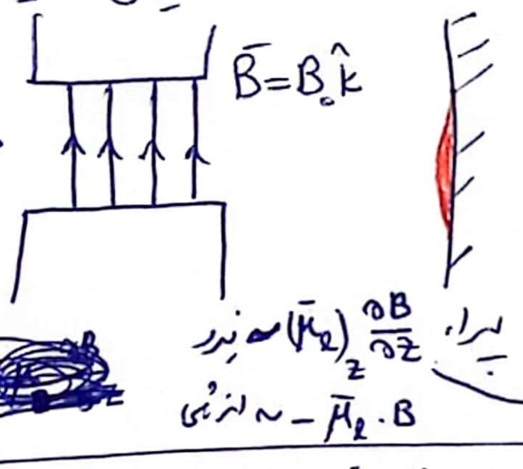
$$= -\theta_b(\tau^{L1}+\tau^{LL}+\tau^{R1}+\tau^{LR}) - \left(\theta_b + \frac{\Delta T}{2}\frac{\partial \theta_b}{\partial T}\Big|_{T_b}\right)(\tau^{11}+\tau^{L1}) - \sum_{j=2}^{N-1}\theta_j(\tau^{j1}+\tau^{Lj}) - \left(\theta_b - \frac{\Delta T}{2}\frac{\partial \theta_b}{\partial T}\Big|_{T_b}\right)(\tau^{N1}+\tau^{LN})$$

$$= -\theta_b(\tau^{L1}+\tau^{LL}+\tau^{R1}+\tau^{LR}+\tau^{11}+\tau^{L1}+\tau^{N1}+\tau^{LN}) - \frac{\Delta T}{2}(\tau^{11}+\tau^{L1}-\tau^{N1}-\tau^{LN})\frac{\partial \theta_b}{\partial T}\Big| - \sum_{j=2}^{N-1}\theta_j(\tau^{j1}+\tau^{Lj})$$

1

اسپین — آزمایش اشترن-گرلاخ

میدان مغناطیسی یکنواخت



ماده بدون گشتاور مغناطیسی

$\vec{L}=0$

$\vec{B}=B_0\hat{k}$

یک لکه از دید کلاسیک انتظار داریم

پرده

$\vec{\mu}_l \sim \vec{L}$

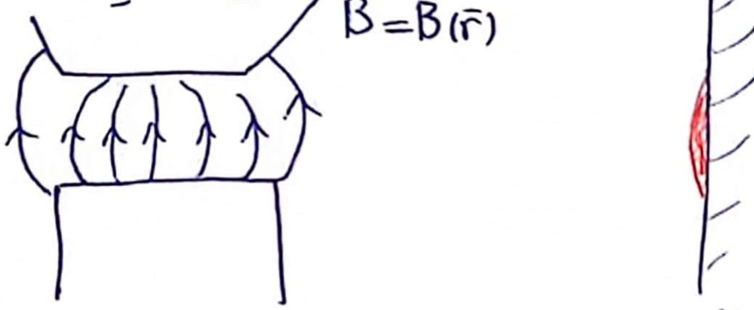
نیرو $(\vec{\mu}_l)_z \frac{\partial B}{\partial z}$

انرژی $\sim -\vec{\mu}_l \cdot B$

میدان مغناطیسی ناشی از گشتاورهای مداری

میدان مغناطیسی

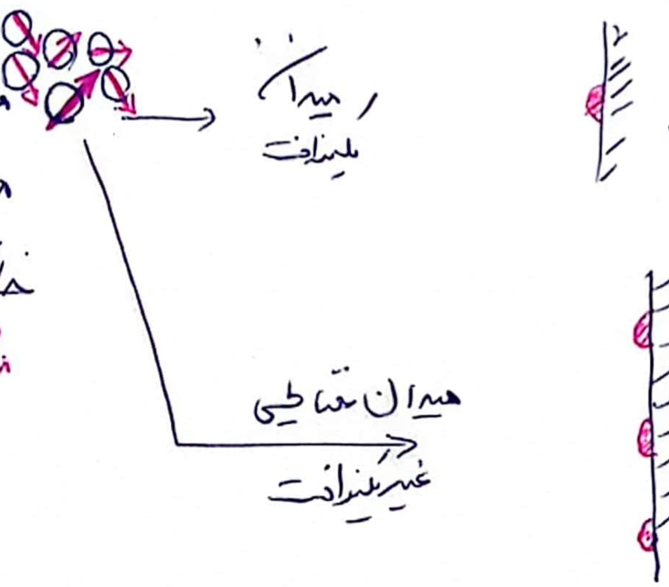
$\vec{B}=\vec{B}(\vec{r})$



ماده بدون گشتاور مغناطیسی

$L=0$

پرده



ماده با گشتاور مداری (مولفه z کوانتیده)

خاصیت مغناطیسی دارد

میدان یکنواخت

میدان مغناطیسی غیر یکنواخت

میدان مغناطیسی ثابت فقط گشتاور را به ماده وارد می‌کند و نیرو را اعمال نمی‌کند

مثال

$L_z=\hbar$

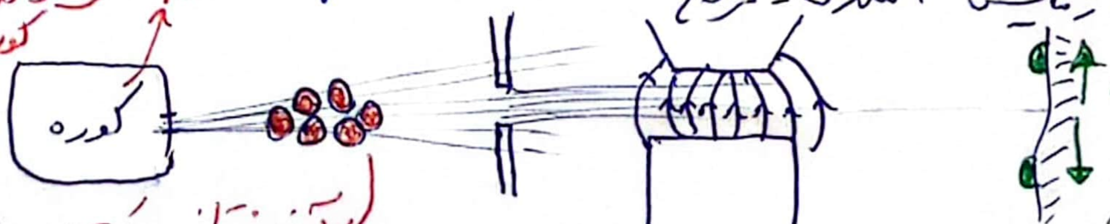
$L_z=0$

$L_z=-\hbar$

نیروی ناشی از میدان مغناطیسی غیریکنواخت برای ذرات با L_z های متفاوت باهم فرق می‌کند لذا (3 لکه می‌بینیم برای مثال روبرو)

در حالت زمینی اتم سولفرات — در مسئله شکل از اتم با چند الکترون، الکترون تراز آخر

آزمایش اشترن-گرلاخ



اتم های نقره از داخل کوره

کوره

2 لکه مشاهده شد

انحراف یکسان نسبت به خط افق

آخرین تراز الکترون ها $L_z=0$ دارای $L=0$ است ← اوربیتال s است آخرین الکترون

خاصیت مغناطیسی ناشی از $\vec{L}$ ندارد

از لحاظ کلاسیک نمی‌توان توصیف کرد

جمع‌بندی آزمایش:

- اتم نقره خاصیت مغناطیسی دارد که ناشی از تکانه زاویه‌ای مداری نیست
- [illegible] (هر الکترون) خاصیت مغناطیسی ذاتی دارد
- به هر الکترون می‌توان یک تکانه زاویه‌ای اسپینی نسبت داد.
- مولفه z تکانه زاویه‌ای اسپینی الکترون گسسته است
- تکانه زاویه‌ای مداری و اسپینی روی هم رفته خاصیت مغناطیسی اتم را مشخص می‌کنند

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

- عدد کوانتومی اسپین (مولفه z اسپین) کوانتیده است ← نیم صحیح هست. مهم

مثال

عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری

$$l = 1 \longrightarrow m_l \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \qquad \begin{aligned} L_z &= \hbar \\ L_z &= 0 \\ L_z &= -\hbar \end{aligned}$$

عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای اسپینی

نیم صحیح

$$S = 1/2 \longrightarrow m_s \begin{cases} +1/2 \\ -1/2 \end{cases} \qquad \begin{aligned} S_z &= \frac{\hbar}{2} \\ S_z &= -\frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

* نکته، برای تمامی اعداد کوانتومی برچسب‌گذاری s و m_s برای الکترون همیشه ثابت است.

خاصیت مغناطیسی:

- ناشی از حرکت الکترون‌ها به دور هسته (تکانه زاویه‌ای مداری)
- ناشی از اسپین الکترون‌های موجود در اتم (تکانه زاویه‌ای اسپینی)

در حالت کلی → $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$

تکانه زاویه‌ای

حالت اتم ← اطلاعات فضایی الکترون
← اطلاعات اسپینی الکترون

$$|\alpha\rangle = |n, l, m_l, s, m_s\rangle = |n, l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$$

$|n, l, m_l\rangle$ ← بخش فضایی یک حالت

$|s, m_s\rangle$ ← بخش اسپینی یک حالت

عملگرها ← دو دسته‌اند
← اسپینی ← $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{S}^2, \dots$ → همواره شکل ماتریسی دارند
← فضایی ← $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{r}, \hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ ، $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z, \hat{L}^2, \dots$

← می‌توانند شکل دیفرانسیلی یا ماتریسی داشته باشند
← همان توابع دینامیکی که از کلاسیک وارد کوانتوم می‌شوند
← عملگرهای اسپینی مشابه کلاسیکی ندارند
← نمی‌توان برحسب $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ نوشت ← شکل آنها ماتریسی است

$\hat{S}_x$ ← مؤلفه x اسپین

$\hat{S}_y$ ← مؤلفه y اسپین

$\hat{S}_z$ ← مؤلفه z اسپین

$\hat{S}^2$ ← اندازه (توان دوم) اسپین

$\hat{S} = \hat{S}_x\hat{i} + \hat{S}_y\hat{j} + \hat{S}_z\hat{k}$ ← عملگر بردار اسپین

← قواعد جابجایی مشابه با قواعد حاکم بر تکانه زاویه‌ای مداری دارند

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$$

$$\Rightarrow [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$$

* نکته: عملگرهای اسپینی با عملگرهای فضایی جابجا می‌شوند *

$$[\underset{\text{اسپینی}}{\hat{A}}, \underset{\text{فضایی}}{\hat{B}}] = 0$$

4

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

$$\longrightarrow \begin{cases} [\hat{S}^2, \hat{S}_x] = 0 \\ [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = 0 \\ [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0 \end{cases}$$

اثر عملگرهای اسپین در کت حالت

ابتدا اثر عملگر تکانه زاویه‌ای مداری را یادآوری می‌کنیم

$$\hat{L}^2 |n,l,m_l,s,m_s\rangle = \hat{L}^2 |n,l,m_l\rangle \otimes |s,m_s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n,l,m_l,s,m_s\rangle$$

$$\hat{L}_z |n,l,m_l,s,m_s\rangle = \hat{L}_z |n,l,m_l\rangle \otimes |s,m_s\rangle = m_s\hbar |n,l,m_l,s,m_s\rangle$$

* عملگرهای فضایی در بخش فضایی تابع موج اثر می‌کنند

$$\hat{S}^2 |n,l,m_l,s,m_s\rangle = |n,l,m_l\rangle \otimes \hat{S}^2 |s,m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |n,l,m_l,s,m_s\rangle$$

$$\hat{S}_z |n,l,m_l,s,m_s\rangle = |n,l,m_l\rangle \otimes \hat{S}_z |s,m_s\rangle = m_s\hbar |n,l,m_l,s,m_s\rangle$$

عملگرهای اسپینی در بخش اسپینی کت حالت اثر می‌کنند

عدد کوانتومی اسپین برابر $\frac{1}{2}$ است ($s=1/2$) لذا همواره داریم

$$\hat{S}^2 |n,l,m_l,1/2,m_s\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |n,l,m_l,1/2,m_s\rangle$$

مثال/ کت حالت الکترون با اسپین بالا در اتم هیدروژن در حالت پایه چگونه است

$$|\alpha\rangle = |1\,0\,0\rangle \otimes |1/2, \boxed{+\tfrac{1}{2}}\rangle = |1, 0, 0, \tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle$$

n, l, m_l, s, m_s

۵

مثال/ الکترون با اسپین پایین در حالت پایه اتم هیدروژن:

$$|\alpha\rangle = |100\rangle \otimes |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = |1,0,0,\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle$$

مثال/ اتم هیدروژن ← اولین حالت برانگیخته ← اسپین دلخواه

$$\begin{cases}
|2\,0\,0\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \\
|2\,0\,0\,\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle \\
|2\,1\,1\,\tfrac{1}{2}\,+\tfrac{1}{2}\rangle \\
|2\,1\,1\,\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle \\
|2\,1\,-1\,\tfrac{1}{2}\,+\tfrac{1}{2}\rangle \\
|2\,1\,-1\,\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle \\
|2\,1\,0\,\tfrac{1}{2}\,+\tfrac{1}{2}\rangle \\
|2\,1\,0\,\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle
\end{cases}$$

تمرین: اثر عملگرهای $\hat{H}$، $\hat{L}_z$، $\hat{L}^2$، $\hat{S}_z$، $\hat{S}^2$ را روی کت های فوق حساب کنید.

تمرین: مقدار چشمداشتی عملگرهای $\hat{H}$، $\hat{L}_z$، $\hat{L}^2$، $\hat{S}_z$، $\hat{S}^2$ را روی کت فوق اثر کنید.

تمرین ← نشان دهید با احتساب حالت اسپینی، تبهگنی اولین حالت برانگیخته اتم هیدروژن از مرتبه $\underline{8}$ است (نکته: $8 = 4\times 2$)

۹

نمایش ماتریسی عملگرهای اسپینی ← پایه

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

← ~~بردارهای~~ ویژه بردارهای این دو عملگر را به عنوان پایه‌های فضا انتخاب می‌کنیم ← بعداً این پایه‌ها را معرفی خواهیم کرد

$$\hat{S}_z = \begin{bmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$$

$$\hat{S}_x = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x$$

$$\hat{S}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i\frac{\hbar}{2} \\ i\frac{\hbar}{2} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \begin{bmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 \end{bmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\hat{I}$$

$\hat{S}^2 = \hat{S}^{2\dagger}$, $\hat{S}_x = \hat{S}_x^\dagger$, $\hat{S}_y = \hat{S}_y^\dagger$, $\hat{S}_z = \hat{S}_z^\dagger$ ← همه این عملگرها هرمیتی هستند

← $\hat{S}^2$ ، $\hat{S}_z$ در این پایه قطری اند

٧

ویژه مقادیر و ویژه بردارهای عملگرهای اسپین

$$\hat{S}_z = \hbar/2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{cases} \text{ویژه بردار} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |S_z,+\rangle = |+\rangle = |\uparrow\rangle \\ \text{ویژه بردار} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \equiv |S_z,-\rangle = |-\rangle = |\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \frac{\hbar}{2} = \text{ویژه مقدار} \; : \; \hat{S}_z |S_z,+\rangle = \frac{\hbar}{2} |S_z,+\rangle$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ +1 \end{pmatrix} \longrightarrow -\frac{\hbar}{2} = \text{ویژه مقدار} \; : \; \hat{S}_z |S_z,-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |S_z,-\rangle$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{cases} \text{ویژه بردار} \; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |S_x,+\rangle \\ \text{ویژه بردار} \; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \equiv |S_x -\rangle \end{cases}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \longrightarrow +\frac{\hbar}{2} = \text{ویژه مقدار} \; : \; \hat{S}_x |S_x,+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |S_x,+\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \longrightarrow -\frac{\hbar}{2} = \text{ویژه مقدار} \; : \; \hat{S}_x |S_x,-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |S_x,-\rangle$$

۸

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{cases} \text{ویژه بردار} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \equiv |S_y, +\rangle \\ \\ \text{ویژه بردار} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \equiv |S_y, -\rangle \end{cases}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \longrightarrow \frac{\hbar}{2} = \text{ویژه مقدار} \Rightarrow \hat{S}_y |S_y, +\rangle = \frac{\hbar}{2}|S_y, +\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \longrightarrow -\frac{\hbar}{2} = \text{ویژه مقدار} \Rightarrow \hat{S}_y |S_y, -\rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_y, -\rangle$$

نکات:

← ویژه مقدارهای عملگرهای $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$ و $\hat{S}_z$ برابر $+\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ است

← عملگرهای $\hat{S}_x$ ، $\hat{S}_y$ ، $\hat{S}_z$ غیرتبهگن هستند

ویژگی عملگر $\hat{S}_z$ ← ویژه بردارهای آن متعامد هستند و نرمالیزه هستند

← هر سه ناتبهگن

$$\langle + | - \rangle = (1 \quad 0)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle - | + \rangle = (0 \quad 1)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle + | + \rangle = (1 \quad 0)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle - | - \rangle = (0 \quad 1)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

تمرین: نشان دهید ویژه بردارهای عملگر $\hat{S}_x$ متعامد و نرمالیزه هستند

تمرین: نشان دهید ویژه بردارهای عملگر $\hat{S}_y$ متعامد و نرمالیزه هستند

نمایش تصویری عملگرهای اسپین در پایه $\hat{S}_z$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle+| - \frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle-|$$

اثبات: $\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(1\ \ 0) - \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}(0\ \ 1) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle-| + \frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle+|$$

تمرین: با جاگذاری $|+\rangle$ و $|-\rangle$ ، $\langle-|$ و $\langle+|$ عبارت فوق را تحقیق کنید

$$\hat{S}_y = -i\frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle-| + i\frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle+|$$

تمرین: عبارت فوق را تحقیق کنید

~~کت حالت های ...~~

کت حالت

$$|\alpha\rangle = |\text{فضایی}\rangle \otimes |\text{اسپینی}\rangle$$

کت اسپینی را بتوان در پایه $\hat{S}_z$ نوشت

$$|\text{اسپینی}\rangle = \square\,|+\rangle + \square\,|-\rangle$$

مثال / کت اسپینی ذره‌ای به صورت زیر است

$$|\alpha\rangle = a|+\rangle + \frac{3}{5}|-\rangle$$

الف) کت حالت را نرمالیزه کنید.

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \Rightarrow \left(a^*\langle +| + \frac{3}{5}\langle -|\right)\left(a|+\rangle + \frac{3}{5}|-\rangle\right)$$

$$= a^2\underbrace{\langle +|+\rangle}_{1} + a^*\frac{3}{5}\underbrace{\langle +|-\rangle}_{0} + \frac{3}{5}a\underbrace{\langle -|+\rangle}_{0} + \frac{9}{25}\underbrace{\langle -|-\rangle}_{1}$$

$$\Rightarrow a^2 + \frac{9}{25} = 1 \Rightarrow a^2 = 1 - \frac{9}{25} = \frac{16}{25}$$

$$a = \frac{4}{5} \Rightarrow |\alpha\rangle = \frac{4}{5}|+\rangle + \frac{3}{5}|-\rangle$$

مثال / $|\alpha\rangle = |+\rangle$

الف) $\langle \hat{S}_z\rangle = ?$

$$\langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle = \langle +|\hat{S}_z|+\rangle = \langle +|\frac{\hbar}{2}|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle +|+\rangle = \frac{\hbar}{2}$$

ب) $\langle \hat{S}_y\rangle = ?$

$$\langle\alpha|\hat{S}_y|\alpha\rangle = \langle +|\hat{S}_y|+\rangle = \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\frac{\hbar}{2}\\ i\frac{\hbar}{2} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0$$

ویژه بردار $\hat{S}_y$ نیست

روش دوم $\langle +|\hat{S}_y|+\rangle = \langle +|\left(-i\frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle -| + i\frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle +|\right)|+\rangle$

$$= -i\frac{\hbar}{2}\underbrace{\langle +|+\rangle}_{1}\underbrace{\langle -|+\rangle}_{0} + i\frac{\hbar}{2}\underbrace{\langle +|-\rangle}_{0}\underbrace{\langle +|+\rangle}_{1} = 0$$

مثال / $|\alpha\rangle = |S_x,+\rangle$

مقدار چشمداشتی $\hat{S}_z$ را حساب کنید

$$\langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle = \langle S_x+|\hat{S}_z|S_x+\rangle$$

در پایه ویژه بردار $\hat{S}_z$ ست

$$= \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}}_{\langle S_x,+|} \underbrace{\begin{pmatrix}\hbar/2 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar}{2}\end{pmatrix}}_{\hat{S}_z} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ 1\end{pmatrix}}_{|S_x,+\rangle} = 0$$

۱۲ Perturbation اختلال، پریشیدگی

اختلال وابسته به زمان

اختلال مستقل از زمان ✓
- هامیلتونی تبهگن
- هامیلتونی ناتبهگن ✓
  - تقریب مرتبه اول ✓
  - تقریب مرتبه دوم

هدف از این بحث: یافتن ویژه‌مقادیر و ویژه‌بردارهای هامیلتونی مختل شده.

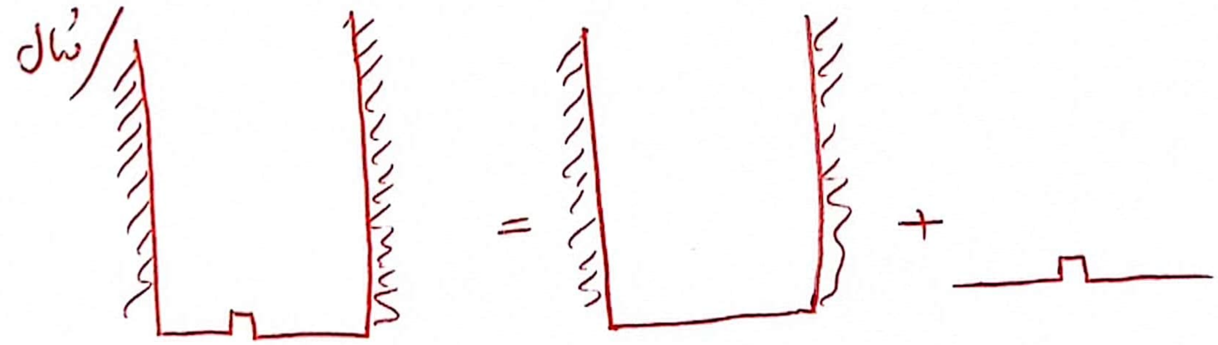
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

$\hat{H}$: هامیلتونی سیستم مورد نظر

$\hat{H}_0$: هامیلتونی مختل نشده

$\hat{H}_1$: ترم اختلال

مثال/



مثال/

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 2.001 & 7i \\ 13 & 4.1 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 7i \\ 13 & 4 \end{bmatrix}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0.001 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}}_{\text{ترم اختلالی}}$$

$\hat{H}$: هامیلتونی سیستم مورد نظر

$\hat{H}_0$ هامیلتونی غیراختلالی

ترم اختلالی

* ممکن است ویژه‌بردارهای $\hat{H}$ متفاوت از ویژه‌بردارهای $\hat{H}_0$ باشند.
* ممکن است ترم اختلالی سبب تغییر ویژه‌مقادیر شده باشد.

۱۳

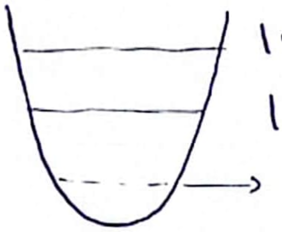
مثال / ذره‌ای مقید در پتانسیل نوسانگر یک بعدی است.

چنانچه پتانسیل ثابت $\underbrace{\lambda V_0}_{\text{عدد}}$ به ذره اعمال شود ویژه مقادیر و ویژه بردارهای سیستم را حساب کنید

بدون اختلال:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \Rightarrow \hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$



$|2\rangle \quad , \quad E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$

$|1\rangle \quad , \quad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

$|0\rangle \quad , \quad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

در حضور اختلال

$$\hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \lambda V_0$$

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\lambda V_0}_{\substack{\text{ترم اختلال} \\ \hat{H}_1}}$$

هامیلتونی سیستم

سوال: آیا با حضور این اختلال ویژه بردارها عوض می‌شوند؟؟؟

به عبارتی آیا $|n\rangle$ ها ویژه بردارهای $\hat{H}$ هستند؟؟ امتحان می‌کنیم

$$\hat{H}|n\rangle = \hat{H}_0|n\rangle + \underbrace{\lambda V_0}_{\text{عدد}}|n\rangle = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle + \lambda V_0|n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H}|n\rangle = \left[(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega + \lambda V_0\right]|n\rangle$$

لذا {
ترم اختلالی ویژه بردارها را تغییر نداده: $|n\rangle$ ویژه بردار $\hat{H}$ هم هست

ترم اختلال ویژه مقادیر را عوض کرده

$$(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega \longrightarrow \left[(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega + \lambda V_0\right]$$

۱۴

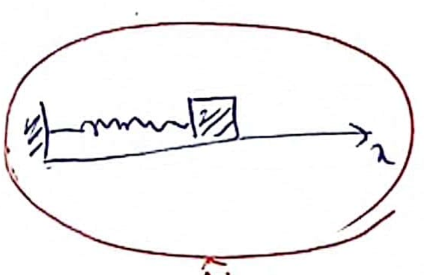
نکته: چنانچه عددی ثابت به هامیلتونی سیستم (نوسانگر، چاه، اتم هیدروژن و ...) اضافه شود ← ویژه بردارها عوض نمی‌شوند

← ویژه مقادیر به اندازه‌ی آن عدد اضافه می‌شود.

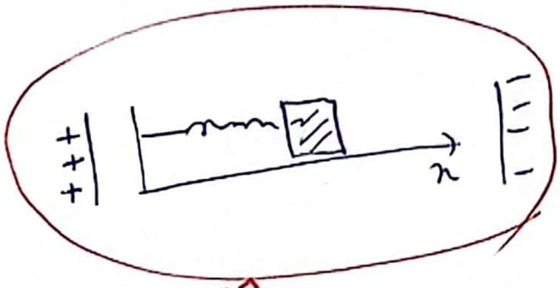
مثال/ هامیلتونی سامانه‌ای به صورت زیر است

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}_{\hat{H}_0} + \lambda q x$$

ترم اختلالی ← ناشی از قرار گرفتن سامانه در میدان الکتریکی در راستای x



$\hat{H}_0$



$\hat{H}$

ابتدا بررسی هامیلتونی مختل نشده:

$$\hat{H}_0 |n\rangle = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega |n\rangle$$

$$\psi_n(x) = \langle n|x\rangle = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}\; H_n(\sqrt{\alpha}x)\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

هامیلتونی در حضور اختلال:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \lambda q x = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x + \lambda\frac{q}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\lambda^2 q^2}{m^2\omega^4}$$

۱۵

$$x' = x + \frac{\lambda q}{m\omega^2} \quad ,$$

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x'^2}_{\hat{H}_0} - \underbrace{\frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\lambda^2 q^2}{m^2\omega^4}}_{= \text{عدد ثابت}}$$

فقط x' شد.

لذا طبق صفحه قبل:

$$\psi_n \longrightarrow \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt[2]{\frac{1}{2^n n!}}\, H_n\left(\sqrt{\alpha}\left(x + \frac{\lambda q}{m\omega^2}\right)\right) e^{-\frac{\alpha\left[x + \frac{\lambda q}{m\omega^2}\right]^2}{2}}$$

$$E_n \longrightarrow \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \underbrace{\left(-\frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\lambda^2 q^2}{m^2\omega^4}\right)}_{\text{شیفت در انرژی}}$$

مثال / اتم هیدروژن در میدان مغناطیسی یکنواخت $\bar{B} = B\hat{k}$ ۱۴

چنانچه از نقش اسپین صرف نظر کنیم ⇐ ممان مغناطیسی ناشی از تکانه زاویه‌ای مداری

$$\bar{\mu}_L = -\frac{|e|}{2mc}\bar{L}$$

اتم با ممان مغناطیسی $\bar{\mu}_L$ در میدان مغناطیسی $\bar{B}$ پتانسیل زیر را احساس خواهد کرد

$$V = -\bar{\mu}_L \cdot \bar{B}$$

$$\bar{B} = B\hat{k} \Rightarrow V = -\left(\frac{-|e|}{2mc}\right)\bar{L}\cdot B\hat{k}$$

$$V = \frac{|e|B}{2mc}L_z$$

لذا هامیلتونی در حضور میدان مغناطیسی خارجی:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{K}{r}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{|e|B}{2mc}\hat{L}_z}_{\hat{H}'}$$

$\hat{H}$: هامیلتونی مختل شده

$\hat{H}_0$: هامیلتونی مختل نشده

$\hat{H}'$: ترم اختلالی

$$\hat{H}_0|n,l,m_l\rangle = -\frac{13.6}{n^2}|n,l,m_l\rangle$$

سوال ← آیا $|n,l,m_l\rangle$ ویژه بردار هامیلتونی مختل شده است؟

← ویژه مقدار هامیلتونی مختل شده چقدر است

$$\hat{H}|n,l,m_l\rangle = \hat{H}_0|n,l,m_l\rangle + \frac{|e|B}{2mc}\hat{L}_z|n,l,m_l\rangle$$

عدد ← ω_B

۱۷

$$\hat{H}|n,l,m_l\rangle = \hat{H}_0|n,l,m_l\rangle + \omega_B \hat{L}_z|n,l,m_l\rangle$$

$$= -\frac{13.6}{n^2}|n,l,m_l\rangle + \omega_B m_l \hbar |n,l,m_l\rangle$$

$$\boxed{\hat{H}|n,l,m_l\rangle = \left(-\frac{13.6}{n^2} + \omega_B m_l \hbar\right)|n,l,m_l\rangle}$$

← توزیع در انرژی ...

← در حضور میدان خارجی، ویژه بردارها تغییر نکرد

← در حضور میدان خارجی ویژه مقادیر عوض شده است

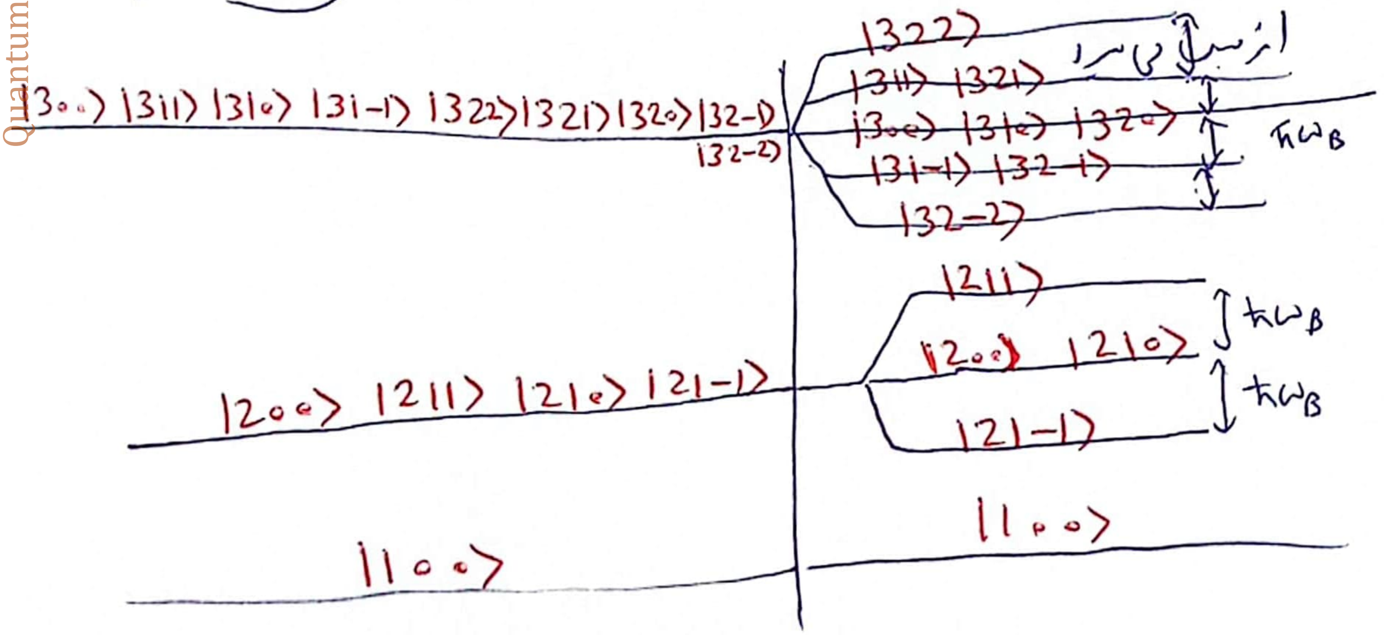
	اتم هیدروژن دست نخورده		اتم هیدروژن در حضور اختلال
حالت پایه	$\|100\rangle$ $E_1=-13.6$	حالت پایه	$\|100\rangle$ $E_1=-13.6+0$
اولین حالت برانگیخته ($E_2=-\frac{13.6}{4}$)	$\|200\rangle$	→	$\|200\rangle$ $E_2=-\frac{13.6}{4}+0$
	$\|211\rangle$	→	$\|211\rangle$ $E_2=-\frac{13.6}{4}+\hbar\omega_B$
	$\|210\rangle$	→	$\|210\rangle$ $E_2=-\frac{13.6}{4}+0$
	$\|21\,{-1}\rangle$	→	$\|210\rangle$ $E_2=-\frac{13.6}{4}-\hbar\omega_B$

۱۸

در این حالت برانگیخته

$$
\left\{
\begin{array}{lcll}
|3\,0\,0\rangle & \longrightarrow & |3\,0\,0\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} + 0 \\
|3\,1\,1\rangle & \longrightarrow & |3\,1\,1\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} + \hbar\omega_B \\
|3\,1\,0\rangle & \xrightarrow{E_3 = -\frac{13.6}{9}} & |3\,1\,0\rangle & E_3 = \frac{-13.6}{9} + 0 \\
|3\,1\,-1\rangle & \longrightarrow & |3\,1\,-1\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} - \hbar\omega_B \\
|3\,2\,2\rangle & \longrightarrow & |3\,2\,2\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} + 2\hbar\omega_B \\
|3\,2\,1\rangle & \longrightarrow & |3\,2\,1\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} + \hbar\omega_B \\
|3\,2\,0\rangle & \longrightarrow & |3\,2\,0\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} \\
|3\,2\,-1\rangle & \longrightarrow & |3\,2\,-1\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} - \hbar\omega_B \\
|3\,2\,-2\rangle & \longrightarrow & |3\,2\,-2\rangle & E_3 = -\frac{13.6}{9} - 2\hbar\omega_B
\end{array}
\right.
$$

لذا میدان مغناطیسی خارجی بخشی از تبهگنی ترازهای اتم هیدروژن را از بین می برد



مثال / اتم هیدروژن در حضور میدان مغناطیسی خارجی قوی با در نظر گرفتن تکانه زاویه‌ای مداری و اسپینی

$\downarrow$

اثر پاشن - باک

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{اتم هیدروژن ساده}} + \underbrace{\frac{|e|B}{2mc}\hat{L}_z}_{\text{اثر تکانه زاویه‌ای مداری}} + \underbrace{\frac{|e|B}{mc}\hat{S}_z}_{\text{اثر تکانه زاویه‌ای اسپینی}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \bar{\mu}_s &= -\frac{|e|}{mc}\bar{S} \\ \text{پتانسیل} &= -\bar{\mu}_s\cdot\bar{B} \\ &= \frac{|e|B}{mc}\hat{S}_z \end{aligned}}$$

تعریف $\frac{|e|B}{mc} = \omega_0$

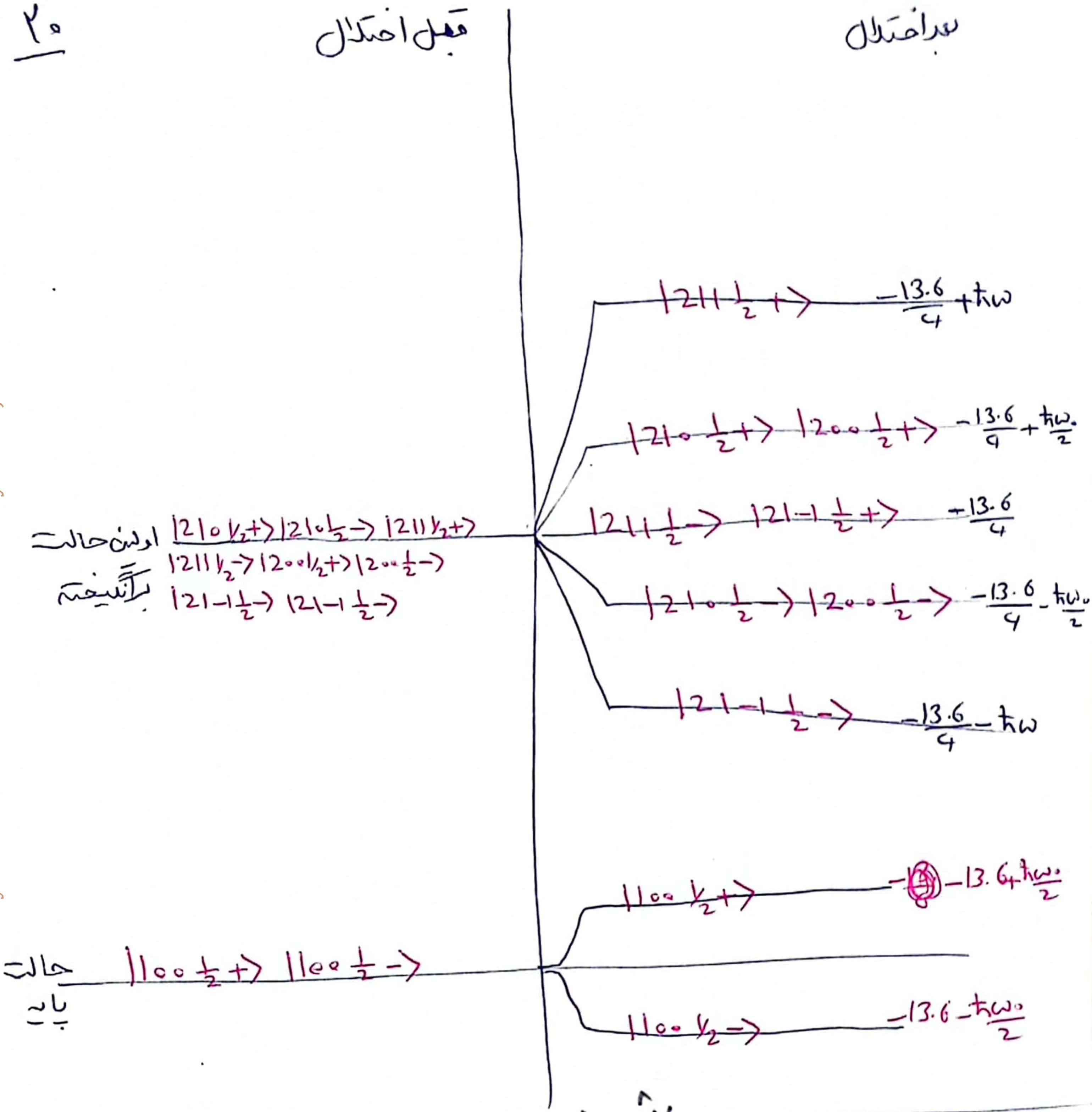
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\omega_0}{2}\hat{L}_z + \omega_0\hat{S}_z$$

می‌دانیم : $\boxed{\hat{H}_0|n,l,m_l,s,s_z\rangle = -\frac{13.6}{n^2}|n,l,m_l,s,m_s\rangle}$

$$\hat{H}|n,l,m_l,s,m_s\rangle = \hat{H}_0|n,l,m_l,s,m_s\rangle + \frac{\omega_0}{2}\hat{L}_z|n,l,m_l,s,m_s\rangle + \omega_0\hat{S}_z|n,l,m_l,s,m_s\rangle$$

$$= -\frac{13.6}{n^2}|n,l,m_l,s,m_s\rangle + m_l\frac{\hbar\omega_0}{2}|n,l,m_l,s,m_s\rangle + m_s\hbar\omega_0|n,l,m_l,s,m_s\rangle$$

$$= \Big(-\frac{13.6}{n^2} + \underbrace{m_l\frac{\hbar\omega_0}{2} + m_s\hbar\omega_B}_{\text{شکست تبهگنی داریم}}\Big)|n,l,m_l,s,m_s\rangle$$



$\hat H = \hat H_0 + \hat H'$

جمع بندی ← چنانچه ویژه بردارهای هامیلتونی اختلالی و غیراختلالی یکسان باشد

$$\hat H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

$$\hat H_0|\psi_n\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n\rangle$$

آنگاه $E_n^{(0)}$ ها ویژه مقادیر هامیلتونی غیراختلالی است.

$$E_n = E_n^0 + \langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_n \rangle$$

$$E_n = \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \hat{H}_0 + \hat{H}' | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \hat{H}_0 | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_n \rangle = E_n^{(0)} + \langle \hat{H}' \rangle$$

که $\hat{H}'$ ترم اختلال است

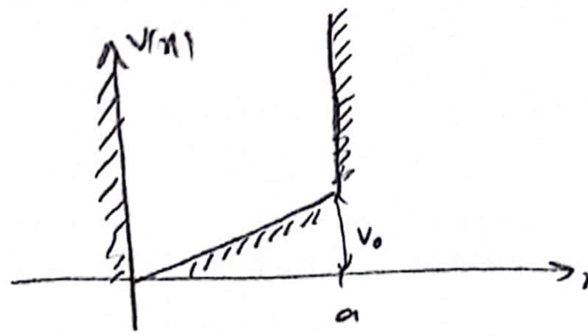
تمرین: فرمول فوق را برای مثال‌های مطرح شده قبلی بکار ببرید

تمرین: اثر زیمان را مطالعه نموده و به عنوان تمرین ارسال کنید

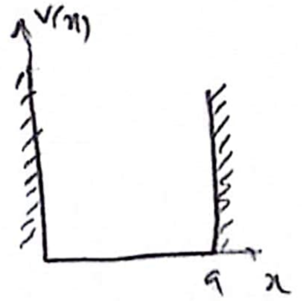
تمرین: اثر اشتارک را مطالعه نموده و به عنوان تمرین ارسال کنید

(مهلت ارسال تمرینات این جلسه تا روز قبل از امتحان)

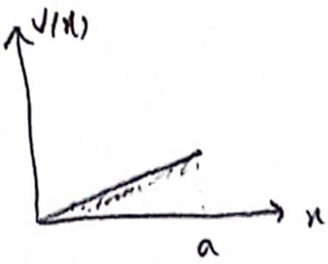
تمرین: با اختلال مرتبه اول تصحیح انرژی را برای سه تراز اول ذره در جعبه به ضلع a مطابق شکل حل کنید



$\equiv$



$+$



$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{ذره در جعبه}} + \hat{H}'$$

$$\hat{H}' = \frac{V_0}{a} x \quad \text{for } 0 < x < a$$